



UNIVERSIDAD  
**NACIONAL**  
DE COLOMBIA

**DINÁMICA E IMPACTO DE EMISIONES ANTRÓPICAS Y  
NATURALES EN UNA CIUDAD ANDINA EMPLEANDO UN  
MODELO EULERIANO DE TRANSPORTE QUÍMICO ON-  
LINE. CASO DE ESTUDIO: MANIZALES, COLOMBIA**

**DYNAMIC AND IMPACT OF ANTHROPOGENIC AND  
NATURAL ATMOSPHERIC EMISSIONS IN AN ANDEAN  
CITY USING AN ON-LINE EULARIAN CHEMISTRY  
TRANSPORT MODEL. CASE STUDY: MANIZALES,  
COLOMBIA**

**CARLOS MARIO GONZÁLEZ DUQUE**

INGENIERO QUÍMICO. MSc.

Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales

Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Departamento de Ingeniería Química

Manizales, Colombia

Año 2017



# **DINÁMICA E IMPACTO DE EMISIONES ANTRÓPICAS Y NATURALES EN UNA CIUDAD ANDINA EMPLEANDO UN MODELO EULERIANO DE TRANSPORTE QUÍMICO ON-LINE. CASO DE ESTUDIO: MANIZALES, COLOMBIA**

**CARLOS MARIO GONZÁLEZ DUQUE**

INGENIERO QUÍMICO. MSc.

e-mail: cmgonzalezd@unal.edu.co; charlesmg5@gmail.com

Tesis presentada como requisito para optar al título de:

**Doctor en Ingeniería - Ingeniería Química**

Director:

Ph.D. Beatriz Helena Aristizábal Zuluaga

Co-Director:

Ph.D. Néstor Yesid Rojas Roa

Línea de Investigación:

Ingeniería Ambiental

Grupo de Investigación:

Grupo de Trabajo Académico en Ingeniería Hidráulica y Ambiental - GTAIHA

Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales

Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Departamento de Ingeniería Química

Manizales, Colombia

Año 2017



---

# AGRADECIMIENTOS

---

Deseo expresar mis más sinceros agradecimientos a todas aquellas personas e instituciones que brindaron su apoyo y aportes desinteresados para la realización de este trabajo. Quiero agradecer principalmente:

A mi FAMILIA por su constante apoyo y esfuerzo, y a Leidy por su apoyo incondicional y ese amor infinito.

A mis directores de tesis, los docentes BEATRIZ HELENA ARISTIZÁBAL ZULUAGA y NÉSTOR YESID ROJAS ROA. Su apoyo a través de su amplio conocimiento y experiencia permitieron guiar este trabajo hacia un feliz término. Sus constantes consejos y exigencia fueron fundamentales para superar las etapas difíciles que se presentaron.

A los integrantes del Grupo de Trabajo Académico en Ingeniería Hidráulica y Ambiental (GTAIHA), y a todos los compañeros de la línea de investigación en Calidad del Aire. Asimismo, a los profesores del departamento de Ingeniería Química e Ingeniería Civil de la Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales.

A mis grandes amigos y colegas MATTHEW H. WAHL y JUAN PABLO MARISCAL por sus consejos y aporte en la elaboración de este trabajo.

A los compañeros del Grupo de Calidad del Aire de la Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá, especialmente a Aura, Alex, Patricia y Edison.

A la profesora Dr. Rita Yuri Ynoue y los estudiantes y profesores del IAG-USP, grupo de investigación LaPat. Un agradecimiento especial a Ángel Vara-Vela, Sergio Ibarra, Mario Gavidia y Miguel Rincón.

A los profesores Dr. Karla María Longo, el Dr. Saulo Ribeiro de Freitas, y los integrantes del grupo de investigación GMAI, del Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE).

Al Ingeniero Mauricio Velasco Garcia, funcionario de CORPOCALDAS por el apoyo brindado durante la investigación y la información suministrada.

Al Servicio Geológico Colombiano por intermedio de la Ingeniera Zoraida Chacón, por su interés en colaborarnos con la investigación y brindarnos información del volcán Nevado del Ruiz.

A la Secretaría de Tránsito de Manizales por la información suministrada.

A Thorsten Beisiegel por su apoyo en la instalación del modelo WRF-Chem en Manizales.

Al Departamento de Ciencia e Investigación, COLCIENCIAS, por el apoyo económico brindado durante mis estudios doctorales.

Finalmente a mis amigos, esos maestros de la vida por su apoyo constante y su acompañamiento incondicional. Y por supuesto, a la vida por abrir el camino al aprendizaje constante.



## RESUMEN

Ciudades intermedias de países emergentes en Latinoamérica están experimentando un rápido crecimiento. Sin embargo, el estudio de temas relacionados con las emisiones de contaminantes al aire y su dinámica de transformación y dispersión es limitado, aumentando su vulnerabilidad a potenciales efectos adversos derivados de episodios de contaminación atmosférica. Para suplir esta deficiencia, la modelización atmosférica y de calidad del aire se establece como una herramienta fundamental. Sin embargo, su uso en Colombia es limitado, especialmente en ciudades intermedias.

En la primera fase de la investigación, se analizó la contribución a las emisiones de contaminantes del aire en Manizales por fuentes antropogénicas (móviles en ruta y estacionarias puntuales). Se estimaron los flujos anuales de contaminantes criterio, NMVOC, y gases efecto invernadero. Los resultados obtenidos sugieren que la actividad vehicular contribuye con más del 90% de las emisiones para la mayoría de contaminantes evaluados. Las emisiones CO (43.4 Gg/año) y NMVOC (9.6 Gg/año) estuvieron asociadas principalmente al uso de motocicletas (50% y 81% del total de emisiones respectivamente). Los buses de transporte público fueron las principales fuentes de PM<sub>10</sub> (47% - 0.36 Gg/año) y NO<sub>x</sub> (48% - 2.4 Gg/año). Las emisiones antropogénicas fueron desagregadas en tiempo (1h) y espacio (1 km<sup>2</sup>) aplicando una metodología top-down basada en distribución de conteos vehiculares y densidad de la red vial. Esta técnica permitió identificar puntos críticos de emisión en el centro histórico y zonas residenciales-comerciales.

Posteriormente, el modelo de simulación de calidad del aire, WRF-Chem, fue utilizado para evaluar la dinámica de dispersión y transformación de los contaminantes O<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub> y PM<sub>10</sub> en Manizales durante un periodo seco en 2015. Las simulaciones de calidad del aire permitieron evaluar el impacto relativo de las emisiones antropogénicas en la calidad del aire de Manizales; así como el impacto de emisiones volcánicas en la dinámica del SO<sub>2</sub>. Adicionalmente, la representatividad del uso del inventario local versus inventarios globales en la descripción de la dinámica del O<sub>3</sub> y PM<sub>10</sub> en Manizales fue analizada. Los resultados mostraron mejoras significativas al utilizar el inventario local en las simulaciones, obteniendo mejores estadísticos de desempeño para el O<sub>3</sub> (RMSE = 8.8 ppb, r = 0.81); en comparación con los obtenidos al evaluar inventarios globales (RMSE = 13.9 ppb, r = 0.64). Resultado similar se tuvo para concentraciones de PM<sub>10</sub> con valores de 11.5 µg/m<sup>3</sup> (RMSE) mediante el uso del inventario local, en comparación con los valores obtenidos usando datos de emisión global (RMSE = 28.8 µg/m<sup>3</sup>). El análisis del impacto relativo de las fuentes de emisión, permitió evidenciar que la química de formación de ozono y los niveles de PM<sub>10</sub> en el aire ambiente de Manizales, son controlados por las emisiones provenientes de fuentes móviles en ruta. En el caso de los perfiles de SO<sub>2</sub>, durante el periodo de estudio se evidenció un mayor impacto de las emisiones antropogénicas en las concentraciones de este contaminante en la ciudad.

Este estudio provee información valiosa en el entendimiento de procesos de emisión, transporte y transformación de contaminantes del aire en ecosistemas de montaña, y establece bases sólidas para la implementación de políticas públicas en la gestión de la calidad del aire de Manizales.

**Palabras claves:** Modelización de calidad del aire; inventarios de emisión; fuentes móviles en ruta; fuentes estacionarias puntuales; WRF-Chem; ozono troposférico; material particulado; dióxido de azufre; ciudades intermedias.



---

## ABSTRACT

---

Cities in emerging countries are facing a fast growth and urbanization; however, the study of air pollutant emissions and its dynamics is scarce, making their populations vulnerable to potential effects of air pollution. This situation is critical in medium-sized urban areas built along the tropical Andean mountains. Atmospheric modeling has been recognized as an essential tool for studying the impacts and dynamics of gases and aerosols on air quality of urban environments. However, their use in Colombia is scarce, especially in medium-sized cities.

This work evaluates first the contribution of on-road vehicular and point-source industrial activities in the medium-sized Andean city of Manizales, Colombia. Annual fluxes of criteria pollutants, NMVOC, and greenhouse gases were estimated. Emissions were dominated by vehicular activity, with more than 90% of total estimated releases for the majority of air pollutants. On-road vehicular emissions for CO (43.4 Gg/yr) and NMVOC (9.6 Gg/yr) were mainly associated with the use of motorcycles (50% and 81% of total CO and NMVOC emissions respectively). Public transit buses were the main source of PM<sub>10</sub> (47% - 0.36 Gg/yr) and NO<sub>x</sub> (48% - 2.4 Gg/yr). The emissions were disaggregated in space (1 km<sup>2</sup>) and time (1 h) through the application of a top-down method based on the analysis of traffic flow levels and road network distribution, allowed the identification of several hotspots of emission in the downtown zone and the residential and commercial area of Manizales.

Local emissions were employed in the evaluation of the fully-coupled on-line WRF-Chem model for analyzing dynamics of O<sub>3</sub>, PM<sub>10</sub> and SO<sub>2</sub> pollution in Manizales during a dry period in 2015. The numerical study aimed to evaluate the relative impact of on-road vehicular and industrial point-source emissions on PM<sub>10</sub> and O<sub>3</sub> dynamics in the city; as well as, the impact of volcanic and anthropogenic emissions in SO<sub>2</sub> dynamics. Furthermore, the influence of using local or global emission inventories (EI) in the representation of O<sub>3</sub> profiles and PM<sub>10</sub> concentrations in the medium-sized Andean city of Manizales was analyzed. The use of local emission fluxes in a high-resolution WRF-Chem simulation, allowed significant improvements in O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> representation, characterized by a better performance metrics RMSE (8.8 ppb) and r coefficient (0.81), than that obtained from the use of a global database (RMSE = 13.9 ppb and r = 0.64). A similar pattern was obtained for PM<sub>10</sub> concentrations with values of 11.5 µg/m<sup>3</sup> (RMSE) using the local EI, compared with those obtained from simulations with the global EI (RMSE = 28.8 µg/m<sup>3</sup>). Analysis of the relative impact of anthropogenic emissions suggests that PM<sub>10</sub> levels and ozone chemistry in the urban area of Manizales were controlled by emissions of its precursors from on-road vehicular sources. Furthermore, results suggested that anthropogenic sources controlled SO<sub>2</sub> dynamics in the urban area of the city.

Results obtained in this study provides additional bases to improve the understanding of air pollutant fluxes, transport and transformation in the atmosphere over mountainous ecosystems, and provides valuable tools to local public policy decisions.

**Keywords:** Air quality modelling; emission inventories; on-road vehicular sources; industrial point-sources; WRF-Chem; tropospheric ozone; particulate matter; medium-sized cities.



---

# TABLA DE CONTENIDO

---

<b>OBJETIVOS.....</b>	<b>21</b>
<b>CAPÍTULO 1</b>	
<b>INTRODUCCIÓN Y PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....</b>	<b>27</b>
<b>CAPÍTULO 2</b>	
<b>ESTIMACIÓN DEL INVENTARIO DE EMISIONES PARA LA CIUDAD DE MANIZALES .....</b>	<b>37</b>
2.1.    GENERALIDADES SOBRE INVENTARIOS DE EMISIÓN .....	37
2.2.    ANTECEDENTES DE ELABORACIÓN DE INVENTARIOS DE EMISIÓN EN COLOMBIA Y SURAMÉRICA .....	39
2.3.    EMISIONES POR FUENTES MÓVILES EN RUTA Y EL USO DE MODELOS DE EMISIÓN PARA SU ESTIMACIÓN.....	44
2.4.    ASPECTOS METODOLÓGICOS GENERALES EN LA ELABORACIÓN DEL INVENTARIO DE EMISIONES POR FUENTES MÓVILES EN RUTA Y FUENTES ESTACIONARIAS PUNTUALES EN MANIZALES .....	49
2.5.    RESULTADOS.....	57
<b>CAPÍTULO 3</b>	
<b>APLICACIÓN DE MODELIZACIÓN NUMÉRICA PARA EL ESTUDIO DE LA CALIDAD DEL AIRE EN MANIZALES .....</b>	<b>105</b>
3.1.    LOS MODELOS EULERIANOS Y EL ESTUDIO DE LA CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA .....	105
3.2.    GENERALIDADES SOBRE EL MODELO WRF-CHEM .....	106
3.3.    ASPECTOS METODOLÓGICOS GENERALES PARA LA SIMULACIÓN DE CALIDAD DEL AIRE EN MANIZALES .....	116
3.4.    RESULTADOS.....	129
<b>CAPÍTULO 4</b>	
<b>CONCLUSIONES, RECOMENDACIONES Y TRABAJO FUTURO .....</b>	<b>179</b>
<b>ANEXOS.....</b>	<b>183</b>
<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>229</b>



## LISTADO DE FIGURAS

### *Capítulo 1.*

- Figura 1.1. Población urbana y rural en el mundo desde 1950 y proyección a 2050..... 27
- Figura 1.2. Componentes de un Plan de Gestión de Calidad del Aire (PGCA)..... 29
- Figura 1.3. Ubicación de Manizales sobre la vertiente occidental de la Cordillera Central de los Andes. .... 29
- Figura 1.4. Componentes y objetivos específicos necesarios para llevar a cabo la simulación de calidad del aire en Manizales utilizando el modelo euleriano de transporte químico WRF-Chem. 35

### *Capítulo 2.*

- Figura 2.1. Dimensiones de un inventario de emisión y ejemplos de sus características. .... 40
- Figura 2.2. Esquema de cálculo del término VSP..... 48
- Figura 2.3. Dimensiones y características definidas para la estimación del IE por fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales en la ciudad de Manizales..... 50
- Figura 2.4. Diagrama con procedimientos generales para la aplicación de la metodología IVE en la ciudad de Manizales..... 52
- Figura 2.5. Metodología llevada a cabo en la estimación del IE por fuentes estacionarias puntuales en Manizales. .... 55
- Figura 2.6. Cobertura horaria de las jornadas laborales para la desagregación temporal de las emisiones por fuentes estacionarias puntuales en Manizales..... 56
- Figure 1. Emission inventory domain for on-road vehicular and industrial point-sources in Manizales, Colombia. .... 60
- Figure 2. Emission distribution by vehicular type (left) and total on-road vehicular fleet composition (right) in Manizales, Colombia. .... 66
- Figure 3. Emission distribution by fuel type from on-road vehicular sources (left) and fuel distribution in vehicular fleet (right) in Manizales, Colombia..... 66
- Figure 4. Per-capita index (PCI) of on-road vehicular emission for different cities around the world. .... 69
- Figure 5. Point-source emission distribution by industrial activity (left). The fraction of each industrial process in total industry of Manizales is shown to the right as a function of number of facilities (upper-right) and number of point sources (lower-right). .... 70
- Figure 6. Industrial point-source emissions in Manizales, Colombia by type of combustion process (left). Distribution of fuel type by total industrial point sources is shown to the right. .... 70

Figure 1. Study area for disaggregating the on-road vehicular EI in Manizales. Grid cells are shown with a resolution of 1km x 1km. ....	79
Figure 2. Thiessen polygons traced from traffic count points in Manizales for taxis and trucks. ...	82
Figure 3. Step by step to apply TCC method for getting information from each cell.....	84
Figure 4. Disaggregation factors obtained in Manizales using the traffic counts classification method (TCC) for a) passenger cars (PC) in the three types of roads: highway (Hwy), arterial (Art) and residential (Res); and b) Buses.....	87
Figure 5. Top-down emission inventory map in Manizales using traffic counts classification method for (a) CO and (b) PM <sub>10</sub> . Grid cell of 1km x 1km.....	89
Figure 6. Temporal distribution of a) CO and b) PM <sub>10</sub> emissions in cells with the maximum emissions in a typically working day.....	90
Figure 7. Relative difference for CO emissions between reference method and simplified methods for the spatial disaggregation of the EI in Manizales.....	92
Figure 8. Relative difference for PM <sub>10</sub> emissions between reference method and simplified methods for the spatial disaggregation of the EI in Manizales.....	93
Figure 9. Absolute emission difference for a) CO and b) PM <sub>10</sub> emissions between reference TCC method and the SRN simplified method, which fulfilled the narrow acceptability criterion of 30%. ....	94
Figura 2.7. Distribución espacial de emisiones totales anuales provenientes de fuentes estacionarias puntuales en Manizales para un día laboral típico. ....	100
Figura 2.8. Distribución de emisiones horarias provenientes de fuentes estacionarias puntuales en Manizales para un día laboral típico. ....	101
<b>Capítulo 3.</b>	
Figura 3.1. Esquemas de representación de (a) la coordenada vertical $\eta$ , y (b) la grilla tipo C empleados en el núcleo dinámico ARW. ....	108
Figura 3.2. Diagrama de flujo del sistema de modelización WRF-Chem resaltando los componentes utilizados en esta investigación.....	109
Figura 3.3. Interacciones entre procesos representados mediante parametrización física en WRF-Chem. ....	111
Figura 3.4. Precipitación diaria registrada en la estación meteorológica Hospital durante el año 2015. ....	117
Figura 3.5. Información de flujos horarios de emisión de SO <sub>2</sub> del volcán Nevado del Ruiz utilizados en la simulación con WRF-Chem. ....	120
Figura 3.6. Distribución de pluma de emisión volcánica para la simulación con WRF-Chem. ....	121
Figura 3.7. Ubicación de las estaciones meteorológicas y de calidad del aire (CA) empleadas en este estudio.....	123

Figura 3.8. Concentraciones de O <sub>3</sub> obtenidas en la estación GOB durante el año 2015.....	130
Figura 3.9. Variación temporal promedio de concentraciones de O <sub>3</sub> en Manizales durante 2015.	131
Figura 3.10. Reportes de ciclos diurnos de O <sub>3</sub> durante el año 2015 en las RVCA de Medellín (izquierda) y Bogotá (derecha).....	131
Figura 3.11. Concentraciones de SO <sub>2</sub> obtenidas en la estación GOB durante el año 2015.....	132
Figura 3.12. Variación temporal promedio de concentraciones de SO <sub>2</sub> en Manizales durante 2015. ....	133
Figura 3.13. Evolución temporal de concentraciones diarias de PM <sub>10</sub> en Manizales durante el año 2015.....	134
Figura 3.14. Gráficos de cajas y bigotes de concentraciones diarias de PM <sub>10</sub> para las estaciones de CA en Manizales. ....	134
Figure 1. Configuration of model simulation domains (left). Zoom maps are shown for the fine-grid domain D4 (top-right) and urban area of Manizales city (bottom-right), including location of monitoring stations used in this study (Met: Meteorology; AQ: Air quality).....	139
Figure 2. Observed and predicted hourly variations of temperature, relative humidity, wind speed and direction at SGC, HOS and NUB meteorological stations, for the baseline simulation in the 1 km modelling domain (D4).....	145
Figure 3. Observed and predicted wind roses during day-night periods at SGC, HOS and NUB stations for the baseline simulation in the 1 km modelling domain (D4). ....	146
Figure 4. Comparison of observed and predicted hourly variations of surface ozone in Manizales (GOB station) using local and global EIs. ....	147
Figure 5. Distribution of NO (left) and NO <sub>2</sub> (right) emission fluxes scaled into D4 domain for WRF-Chem simulations.....	148
Figure 6. Simulated mean hourly concentrations of O <sub>3</sub> (right) and NO <sub>2</sub> (left) in the 1 km modelling domain (D4), using global emission inputs from the EDGAR-HTAP database.....	151
Figure 7. Simulated mean hourly concentrations of O <sub>3</sub> (right) and NO <sub>2</sub> (left) in the 1 km modelling domain (D4), using emissions inputs from the local EI estimated in Manizales. ....	152
Figure 8. Observed and simulated mean hourly concentrations of O <sub>3</sub> in the 1 km modelling domain (D4), for three different emission scenarios.....	153
Figure 9. Distribution of PM <sub>10</sub> emission fluxes scaled into D4 domain for WRF-Chem simulations. ....	155
Figure 10. Simulated daily mean PM <sub>10</sub> concentrations in the 1 km modelling domain (D4) during July 1 (left) and July 4 (right), using emissions inputs from: a) The local EI estimated in Manizales. b) EDGAR-HTAP database. ....	155
Figura 3.15. Patrones de dispersión de SO <sub>2</sub> registrados en las imágenes satelitales AURA/OMI (izquierda) y comparación con resultados de concentración de SO <sub>2</sub> obtenidos con WRF-Chem en el nivel vertical $\eta = 5$ . ....	163

Figura 3.16. Concentración de SO <sub>2</sub> en la estación GOB observada (Obs) y simulada con WRF-Chem en el dominio D4.....	165
Figura 3.17. Diagrama de Taylor comparando los resultados de simulación de SO <sub>2</sub> en superficie (estación GOB) para los diferentes casos de estudio analizados. ....	165
Figura 3.18. Concentración de SO <sub>2</sub> en superficie para diferentes horas (hora local, LST) del día 30 de Junio de 2015, obtenidos con WRF-Chem para la simulación Evi-Evolc (izquierda) y la simulación Evi (derecha). ....	168
Figura 3.19. Concentración de SO <sub>2</sub> en superficie para diferentes horas (hora local, LST) del día 3 de Julio de 2015, obtenidos con WRF-Chem para la simulación Evi-Evolc (izquierda) y la simulación Evi (derecha).....	169
Figura 3.20. Secciones transversales (línea roja) seleccionadas para graficar la variación de concentración de SO <sub>2</sub> con la altura para diferentes horas de simulación de los días 30 de junio y 3 de julio de 2015. ....	171
Figura 3.21. Altura de PBL obtenida en la estación GOB durante la simulación con WRF-Chem .....	172
Figura 3.22. Variación de la concentración de SO <sub>2</sub> para diferentes niveles verticales en la sección transversal A. Resultados para el 30 de junio de 2015 en diferentes horas del día (LST).....	173
Figura 3.23. Variación de la concentración de SO <sub>2</sub> para diferentes niveles verticales en la sección transversal B. Resultados para el 30 de junio de 2015 en diferentes horas del día (LST). ....	174
Figura 3.24. Variación de la concentración de SO <sub>2</sub> para diferentes niveles verticales en la sección transversal A. Resultados para el 3 de julio de 2015 en diferentes horas del día (LST).....	175
Figura 3.25. Variación de la concentración de SO <sub>2</sub> para diferentes niveles verticales en la sección transversal B. Resultados para el 3 de julio de 2015 en diferentes horas del día (LST). ....	176
<b>Anexo A.</b>	
Figure A.1. Monitoring driving circuits during IVE field campaigns in Manizales. ....	184
Figure A.2. Power Bin histograms for each vehicle category analyzed in Manizales during IVE driving pattern campaigns.....	184
Figure A.3. Spatial distribution of traffic count points in Manizales for dynamic fleet composition analysis.....	186
Figure A.4. Dynamic composition of vehicular fleet by hour for a typical working day in Manizales. ....	186
Figure A.5. Fraction of vehicle starts and soak times in Manizales. ....	187
Figure A.6. Distance travelled by passenger cars during the first twenty years of age. ....	187
<b>Anexo E.</b>	
Figure A.1. Relative difference of over and underestimation in disaggregation factors using the traffic counts directly .....	194

Figure A.2. Thiessen polygons traced for every vehicle category and road type. ....	195
Figure A.3. Dynamic composition of vehicular fleet by hour for a typical working day in Manizales. ....	195
Figure A.4. Disaggregation factors of each vehicle category using reference TCC method. ....	198
Figure A.5. Disaggregation factors obtained for simplified methods. ....	199
Figure A.6. Spatial distribution of emissions using reference methods. ....	200
Figure A.7. Relative differences in emissions between reference method and simplified methodologies. ....	202

### **Anexo G.**

Figura 1. Área de estudio y ubicación puntos de monitoreo pasivo. ....	206
Figura 2. Configuración puntos de monitoreo pasivo. ....	207
Figura 3. Concentraciones promedio de SO <sub>2</sub> . a. Distribución entre sectores, b. Distribución espacial. ....	210
Figura 4. Rosas de vientos campañas de monitoreo pasivo. ....	211
Figura 5. Comparación concentraciones de SO <sub>2</sub> medidas por monitoreo pasivo en áreas urbanas del mundo ....	212
Figura 6. Concentraciones promedio de NO <sub>x</sub> . a. Distribución entre sectores, b. Distribución espacial. ....	213
Figura 7. Comparación concentraciones de NO <sub>x</sub> medidas por monitoreo pasivo en áreas urbanas del mundo ....	214
Figura 8. Concentraciones promedio de O <sub>3</sub> . a. Distribución entre sectores, b. Distribución espacial. ....	214
Figura 9. Relación entre concentraciones promedio de NO <sub>x</sub> y O <sub>3</sub> . ....	215
Figura 10. Variación temporal de concentraciones de SO <sub>2</sub> . ....	216
Figura 11. Variación temporal de concentraciones de NO <sub>x</sub> . ....	217
Figura 12. Variación temporal de concentraciones de O <sub>3</sub> . ....	218

### **Anexo H.**

Figure B.1. Taylor diagram comparing individual statistics (r correlation coefficient, RMSE, and standard deviation) for O <sub>3</sub> simulation results, among tests with local and global EIs. ....	227
Figure B.2. Map with location of O <sub>3</sub> PAS stations. ....	227
Figure B.3. Scatter plots comparing mean O <sub>3</sub> concentrations (ppb) obtained from two PAS campaigns during 2015 in Manizales (urban and rural stations), and mean one-week O <sub>3</sub> concentration (ppb) simulated in this study. ....	228

---

## LISTADO DE TABLAS

---

Tabla I. Significado de siglas, abreviaturas y símbolos. ....XVII

### **Capítulo 2.**

Tabla 2.1. Posibles fuentes de información y métodos de cálculo para elaboración de inventarios de emisión en Colombia ..... 38

Tabla 2.2. Algunos casos de estudio en Suramérica donde se ha realizado el cálculo de inventarios de emisión a nivel local y regional..... 41

Tabla 2.3. Características generales de principales modelos empleados en la estimación de emisiones por fuentes móviles en ruta ..... 46

Tabla 2.4. Comparación de requerimientos de algunos insumos principales en los modelos de emisión vehicular IVE, COPERT y MOVES. .... 47

Tabla 2.5. Tipos de factores de ajuste (K) utilizados en el modelo IVE..... 48

Tabla 2.6. Ecuaciones y variables empleadas en la estimación de las emisiones en ruta y por partidas en el modelo de emisiones IVE..... 49

Tabla 2.7. Información de los insumos necesarios para generar el archivo “Location File” en Manizales, utilizado en el modelo de emisiones IVE. .... 53

Tabla 2.8. Fuentes y tipos de información empleada en la definición de la distribución tecnológica del parque automotor de la ciudad de Manizales ..... 54

Table 1. Summary of on-road vehicular emission rates in Manizales, Colombia. .... 62

Table 2. Summary of annual (2014) on-road vehicular and industrial point-source emissions in Manizales, Colombia. .... 64

Table 3. Running and start-up emissions from on-road vehicular sources in Manizales, Colombia. .... 65

Table 4. Comparison of Manizales on-road vehicular emissions with reports of other large and medium-sized cities around the world. .... 67

Table 1. Criteria pollutant and NMVOC emissions from on-road vehicular sources in Manizales during 2014. .... 78

Table 2. Summary of methods used in the spatial disaggregation of the on-road vehicle EI in Manizales. .... 80

Table 3. Summary of Manizales road network characteristics and its segment information..... 81

Table 4. Summary of traffic count points taken in Manizales. .... 81

Table 5. Traffic flow levels for passenger cars at 12h and the intervals define by Jenks natural breaks optimization method for reference TCC method. .... 83

Table 6. Traffic counts classification for TTCC method. ....	85
--	----

### **Capítulo 3.**

Tabla 3.1. Definición de tipos de modelos de transporte químico según su escala espacial.....	106
Tabla 3.2. Algunas herramientas disponibles para incluir flujos de emisión en las rutinas de simulación de WRF-Chem.....	113
Tabla 3.3. Resumen general de procedimientos llevados a cabo para definir la configuración del modelo WRF-Chem en la simulación de calidad del aire en Manizales.....	117
Tabla 3.4. Consideraciones para incluir las emisiones locales y volcánicas en las simulaciones..	119
Ficha de Campo No. 1. Estación de monitoreo de calidad del aire GOBERNACIÓN.....	124
Ficha de Campo No. 2. Estación de monitoreo de calidad del aire LICEO.....	125
Ficha de Campo No. 3. Estación de monitoreo de calidad del aire PALOGRANDE.....	126
Ficha de Campo No. 4. Estación de monitoreo de calidad del aire MILÁN.....	127
Ficha de Campo No. 5. Estación de monitoreo de calidad del aire NUBIA.....	128
Table 1. WRF-Chem configuration options for the baseline simulation in Manizales, Colombia.	139
Table 2. Configuration of physics parameterizations evaluated in the preliminary sensitivity analysis. ....	141
Table 3. Emission characteristics of WRF-Chem simulations in Manizales. ....	141
Table 4. Performance statistics in the preliminary sensitivity analysis.....	144
Table 5. Comparison of mean O <sub>3</sub> concentrations obtained from two PAS campaigns during 2015 in Manizales (urban and rural stations), and mean O <sub>3</sub> concentration simulated in this study. ....	149
Table 6. Comparison of observed and predicted daily mean PM <sub>10</sub> concentrations in Manizales using the local EI and global EDGAR-HTAP emissions. ....	154
Tabla 3.5. Características de las emisiones incluidas en las simulaciones realizadas en Manizales para análisis de la dinámica de dispersión de SO <sub>2</sub> . ....	161
Tabla 3.6. Estadísticos de evaluación para concentración de SO <sub>2</sub> en la estación GOB para los diferentes casos de estudio analizados. ....	165
Tabla 3.7. Comparación de concentraciones promedio de SO <sub>2</sub> obtenidas en 2015 por monitoreo pasivo (PAS) y los promedios de concentración registrados en el periodo de simulación de esta investigación. ....	167
<b>Anexo A.</b>	
Table A.1. Summary of on-road vehicular study in Manizales.....	185
Table A.2. Vehicle technology distribution obtained in Manizales related with IVE vehicular technology categories.....	188

**Anexo B.**

Tabla B.1. Clasificación de categorías vehiculares y subcategorías según peso del vehículo y tamaño del motor. .... 189

**Anexo C.**

Tabla C.1. Calendario de introducción de tecnologías vehiculares en Colombia. Adaptado de Toro et al. (2013) y Rojas (2015). .... 190

**Anexo D.**

Tabla D.1. Campos de información incluidos en la base de datos empleada en la estimación del IE por fuentes estacionarias puntuales en Manizales. .... 191

**Anexo E.**

Table A.1. Traffic flow levels for passenger cars at 12h and the intervals define by Jenks natural breaks optimization method for reference TCC method. .... 196

**Anexo F.**

Tabla F.1. Distribución de especies químicas para NMVOC en el mecanismo químico RADM2. Masa por cada 100g de VOC emitido por fuentes móviles en ruta para Manizales. Datos tomados del estudio de Vara-Vela (2013). .... 203

**Anexo G.**

Cuadro I. Especificaciones de los muestreadores pasivos. .... 207

Cuadro II. Puntos de monitoreo pasivo. .... 208

Cuadro III. Características de campañas de monitoreo pasivo. .... 209

**Anexo H.**

Table B.1. Performance statistics in the preliminary sensitivity analysis. .... 225

## LISTADO DE SIGLAS, ABREVIATURAS Y SÍMBOLOS

**Tabla I. Significado de siglas, abreviaturas y símbolos.**

Siglas y abreviaturas		Símbolos	
Término	Significado	Término	Significado
<i>AAS4WRF</i>	Another Assimilation System for WRF-Chem	<i>A</i>	Activity data Frontal area of the vehicle
<i>AMVA</i>	Area Metropolitana del Valle de Aburrá	<i>a</i>	Vehicle acceleration
<i>ARW</i>	Advance Research WRF	<i>B</i>	EF base
<i>ASOS</i>	Automated Surface Observing System	<i>BC</i>	Elemental carbon
<i>BC</i>	Condiciones de contorno / Boundary conditions	<i>C</i>	Carbon
<i>CDA</i>	Centro de diagnóstico automotor	<i>C<sub>D</sub></i>	Drag coefficient
<i>CDIAC</i>	Centro de Datos e Indicadores Ambientales de Caldas	<i>C<sub>R</sub></i>	Coefficient of rolling resistance
<i>CE-CERT</i>	Centro para la Investigación y Tecnología Ambiental	<i>CO</i>	Monóxido de carbono / Carbon monoxide
<i>CETESB</i>	Companhia Ambiental de Estado de São Paulo	<i>CO<sub>2</sub></i>	Dióxido de carbono / Carbon dioxide
<i>CI</i>	Chemical Industry	<i>CH<sub>4</sub></i>	Metano / Methane
<i>CNG</i>	Compressed natural gas	<i>C<sub>6</sub>H<sub>6</sub></i>	Benceno
<i>CONPES</i>	Consejo Nacional de Política Económica y Social	<i>f</i>	Traffic flow classification factor
<i>COLCIENCIAS</i>	Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación	<i>g</i>	Acceleration of gravity
<i>COPERT</i>	COMputer Programme to Calculate Emissions from Road Transport	<i>grade</i>	Vertical rise/slope length
<i>COPs</i>	Compuestos orgánicos persistentes	<i>h</i>	Altitude of the vehicle
<i>CORPOCALDAS</i>	Corporación Autónoma Regional de Caldas	<i>HCT</i>	Hidrocarburos totales
<i>CRN</i>	Complete Road Network	<i>Hg</i>	Mercurio
<i>CT</i>	Cement Tiles	<i>HR / RH</i>	Humedad relativa / Relative Humidity
<i>CTM</i>	Modelo de transporte químico / Chemical transport model	<i>H<sub>2</sub>O</i>	Agua
<i>desv.std</i>	Desviación estándar	<i>i</i>	Segment identification
<i>DFs</i>	Disaggregation factors	<i>j</i>	Cell number
<i>DU</i>	Unidades Dobson	<i>K</i>	Factor de corrección o ajuste
<i>E</i>	Emission	<i>k</i>	Vehicle category
<i>ECMWF</i>	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts	<i>l</i>	Length of the segment
<i>EDGAR</i>	Emissions Database for Global Atmospheric Research	<i>m</i>	Vehicle mass Type of road
<i>EGR</i>	Exhaust gas recirculation	<i>MB</i>	Mean bias
<i>ESRL</i>	Earth System Research Laboratory	<i>MGE</i>	Mean gross error
<i>EPA</i>	US Environmental Protection Agency	<i>M<sub>i</sub></i>	<i>i</i> th modelled value
<i>FB</i>	Food and Beverage	<i>n</i>	Average removal efficiency Pollutant identification Number of data
<i>FE / EF</i>	Factor de emisión / Emission factor	<i>N<sub>2</sub></i>	Nitrógeno

Siglas y abreviaturas		Símbolos	
Término	Significado	Término	Significado
<i>FI</i>	Improved fuel injection	<i>NH<sub>3</sub></i>	Ammonia
<i>FNL</i>	Final Analysis	<i>NO<sub>x</sub></i>	Óxidos de nitrógeno / Nitrogen oxides
<i>GEI / GHG</i>	Gases efecto invernadero / Greenhouse gases	<i>NMVOG / COVNM</i>	Non-methane volatile organic compounds / Compuestos orgánicos volátiles diferentes al metano
<i>GEIA</i>	Global Emissions InitiAtive	<i>N<sub>2</sub>O</i>	Óxido nitroso / Nitrous oxide
<i>GFS</i>	Global Forecast System	<i>O<sub>i</sub></i>	ith observed value
<i>GMAI</i>	Grupo de Modelagem da Atmosfera e Interfaces	<i>O<sub>3</sub></i>	Ozono troposférico / Tropospheric ozone
<i>GPS</i>	Global Positioning Satellite	<i>OC</i>	Organic carbon
<i>GRIB</i>	General Regularly-Distributed Information in Binary	<i>PBL</i>	Capa Límite Planetaria / Planetary Boundary Layer
<i>GSSR</i>	Investigación de Sistemas Sustentables Globales	<i>PAH</i>	Polycyclic Aromatic Hydrocarbons
<i>GTAIHA</i>	Grpo de Trabajo Académico en Ingeniería Hidráulica y Ambiental	<i>Pb</i>	Plomo
<i>GVWR</i>	Gross vehicle weight rating	<i>PCDD/Fs</i>	Dioxinas y Furanos
<i>hab. / inhab.</i>	Habitantes / Inhabitants	<i>p<sub>h</sub></i>	Componente hidrostática de la presión
<i>IDEAM</i>	Instituto de Hidrología, Meteorología y Estudios Ambientales	<i>p<sub>hs</sub></i>	Presión en superficie
<i>INECC</i>	Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático	<i>p<sub>ht</sub></i>	Presión sobre el límite superior del dominio
<i>INPE</i>	Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais	<i>PM</i>	Particulate matter
<i>IC</i>	Condiciones iniciales / Initial conditions	<i>PM<sub>10</sub></i>	Material particulado menor a 10 micrómetros de diámetro / Particulate matter with diameter less than 10 mm
<i>IEA</i>	International Energy Agency	<i>PM<sub>2.5</sub></i>	Material particulado menor a 2.5 micrómetros de diámetro / Particulate matter with diameter less than 2.5 mm
<i>I/M</i>	Inspection and maintenance	<i>q</i>	Razón de mezcla
<i>IE / EI</i>	Inventario de emisión / Emission inventory	<i>Q<sub>[i]</sub></i>	FE ajustados
<i>IPCC</i>	Intergovernmental Panel on Climate Change	<i>r</i>	Pearson correlation coefficient
<i>IVE</i>	International Vehicle Emissions Model	<i>RAIN</i>	Precipitación acumulada / Accumulated total precipitation
<i>ISSRC</i>	Centro Internacional de Investigación de Sistemas Sustentables / International Sustainable Research Center	<i>RMSE</i>	Root mean squared error
<i>LaPat</i>	Laboratorio de Procesos Atmosféricos	<i>S</i>	Sulfur
<i>LW</i>	Radiación de onda larga / Long wave radiation	<i>SO<sub>2</sub></i>	Dióxido de azufre / Sulfur dioxide
<i>MAVDT</i>	Ministerio de Ambiente Vivienda y Desarrollo Territorial. Actualmente Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible (MADS)	<i>SO<sub>x</sub></i>	Óxidos de azufre / Sulfur oxides
<i>MCE</i>	Mass continuity equation	<i>T</i>	Temperatura / Temperature
<i>MEGAN</i>	Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature	<i>t</i>	Tecnología vehicular Time interval
<i>MI</i>	Metallurgical Industry	<i>TSP</i>	Total suspended particles
<i>MOBILE6</i>	Highway Vehicle Emission Factor Model	<i>v</i>	Vehicle velocity
<i>MOVES</i>	Motor Vehicle Emission Simulator	<i>v<sub>w</sub></i>	Head wind into the vehicle
<i>MOZART-4</i>	Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4	<i>VKT</i>	Vehicle Kilometer Traveled
<i>MR</i>	Metropolitan Region	<i>VSP</i>	Vehicle specific power

Siglas y abreviaturas		Símbolos	
Término	Significado	Término	Significado
<i>msnm</i>	Metros sobre el nivel del mar	<i>WD</i>	Dirección del viento / Wind direction
<i>MSWI</i>	Municipal solid waste incinerator	<i>WS</i>	Velocidad del viento / Wind speed
<i>Multi-Pt FI</i>	Multi-point fuel injection	$\rho_{Air}$	Densidad del aire / Air density
<i>NOAA</i>	National Oceanic and Atmospheric Administration	$\epsilon_i$	Mass factor
<i>NCEP</i>	National Center for Environmental Prediction	$\mu$	Masa de la columna de aire seco
<i>NCAR</i>	National Center for Atmospheric Research	$\phi$	Razón de mezcla escalara
<i>NCL</i>	NCAR Command Language	$\eta$	Coordenada vertical adimensional
<i>NEI</i>	Nacional de Emisiones de Estados Unidos / National Emissions Inventory	$\theta$	Temperatura potencial
<i>NG</i>	Natural gas		
<i>NGrt</i>	Natural gas retrofit		
<i>NM</i>	Non-metallic Minerals		
<i>O</i>	Others		
<i>OLE2</i>	Observatorio Latinoamericano de Eventos Extraordinarios / Latin American Observatory		
<i>OMI</i>	Ozone Monitoring Instrument		
<i>OVSM</i>	Observatorio Vulcanológico y Sismológico de Manizales		
<i>OMS / WHO</i>	Organización Mundial de la Salud / World Health Organization		
<i>PAS</i>	Monitoreo pasivo / Passive sampling monitoring		
<i>PC</i>	Vehículo particular / Passenger cars		
<i>PCArt</i>	Passenger cars in arterial roads		
<i>PCHwy</i>	Passenger cars in highway roads		
<i>PCRes</i>	Passenger cars in residential roads		
<i>PCI</i>	per-capita index of emission		
<i>PGCA / AQMP</i>	Plan de Gestión de Calidad del Aire / Air Quality Management Plan		
<i>PIB / GDP</i>	Producto Interno Bruto / Gross Domestic Product		
<i>PNNL</i>	Pacific Northwest National Laboratory		
<i>ppb</i>	Partes por billón		
<i>ppm</i>	Partes por millón		
<i>RADM2</i>	The second generation Regional Acid Deposition Model		
<i>RETRO</i>	REanalysis of TROpospheric chemical composition		
<i>RPM</i>	Engine revolution per minute		
<i>RUA</i>	Registro Único Ambiental		
<i>RVCA</i>	Red de Vigilancia de Calidad del Aire		
<i>ScanDOAS</i>	Differential Optical Absorption Spectroscopy		
<i>SDA</i>	Secretaría Distrital de Ambiente		
<i>SGC</i>	Servicio Geológico Colombiano		
<i>SIG / GIS</i>	Sistemas de información geográfica / Geographic information systems		
<i>Single-Pt FI</i>	Single-point fuel injection		
<i>SMR</i>	Scrap Metal Recycling		

Siglas y abreviaturas		Símbolos	
Término	Significado	Término	Significado
<i>SPMR</i>	Sao Paulo Metropolitan Region		
<i>SRN</i>	Simplified Road Network		
<i>SW</i>	Radiación de onda corta / Short wave radiation		
<i>TCC</i>	Traffic Count Classification		
<i>TTC</i>	Total Traffic Counts		
<i>TTCC</i>	Total Traffic Counts Classification		
<i>UCR</i>	Universidad de California en Riverside		
<i>UN</i>	United Nations		
<i>US EPA</i>	United States Environmental Protection Agency		
<i>vehic.</i>	Vehículos		
<i>WdI</i>	Wood Industry		
<i>WeI</i>	Waste Incineration		
<i>WPS</i>	WRF Preprocessing System		
<i>WRF</i>	Weather Research and Forecasting Model		
<i>WRF-Chem</i>	Weather Research and Forecasting Model with Chemistry		
<i>2w</i>	Motos / Motorcycles		

# OBJETIVOS

---

## OBJETIVO GENERAL

---

Explicar la dinámica de la contaminación del aire y determinar la importancia de las fuentes de contaminación (antrópicas y naturales) y la meteorología sobre la contaminación del aire en Manizales

---

## OBJETIVOS ESPECÍFICOS

---

1. Elaborar el inventario de emisiones para fuentes móviles en ruta y estacionarias puntuales en la ciudad de Manizales.
2. Desagregar espacial y temporalmente el inventario de emisiones por fuentes móviles en ruta y estacionarias puntuales en el área urbana de Manizales.
3. Incorporar la información de flujos de emisión de los contaminantes atmosféricos estimados, a las rutinas de simulación del modelo de transporte químico WRF-Chem.
4. Establecer la configuración de dominios y esquemas del modelo WRF-Chem que mejor se ajusten a las características de la zona de estudio.
5. Realizar simulaciones para un periodo seco con el fin de evaluar la dinámica de transporte, dispersión y concentraciones de los contaminantes O<sub>3</sub>, PM<sub>10</sub> y SO<sub>2</sub>, asociados a las emisiones antrópicas y volcánicas, y la influencia de la meteorología sobre Manizales.

---

## ESTRUCTURA DE LA TESIS

---

Este trabajo se estructura en cuatro capítulos. En el capítulo uno se muestra la introducción general y planteamiento del problema propuesto en la investigación, describiendo las preguntas a las que se quiere dar respuesta en desarrollo del trabajo. Los capítulos dos y tres se componen de aspectos teóricos relevantes, metodología y resultados obtenidos, abordando los dos componentes principales de este trabajo: el inventario de emisiones para la ciudad de Manizales (capítulo 2) y su aplicación en modelización numérica para el estudio de la calidad del aire (capítulo 3). En el capítulo 4 se presentan las conclusiones producto de la investigación, incluyendo además recomendaciones y propuestas de trabajo futuro.

En los capítulos dos y tres, la mayoría de resultados obtenidos se presentan en formato de artículos (publicados o en proceso de evaluación). Éstos fueron elaborados como parte de la investigación y están relacionados con los objetivos de la tesis. La información adicional que se incluye en las partes iniciales de cada capítulo tiene como fin ampliar la información teórica y metodológica que se considera relevante y que no es mencionada en los artículos presentados. Lo anterior, teniendo en cuenta que los artículos contienen aspectos introductorios, teóricos y metodológicos. En el desarrollo del documento se buscó en lo posible no ser repetitivo en la información suministrada, teniendo en cuenta el formato seleccionado para presentar los resultados de la tesis.

### CONTRIBUCIÓN AL CONOCIMIENTO PRODUCTO DE ESTA INVESTIGACIÓN

La investigación realizada busca generar un aporte al conocimiento en el tema de contaminación atmosférica a nivel urbano, desde el punto de vista de componentes que son de suma importancia en la estructuración de planes de gestión de calidad del aire: el desarrollo de inventarios de emisión, el monitoreo de contaminantes y la modelización de calidad del aire. Estos componentes fueron abordados en una ciudad intermedia Andina de Colombia: la ciudad de Manizales, capital del departamento de Caldas. El estudio de estos temas en una ciudad intermedia es uno de los puntos importantes de este trabajo, teniendo en cuenta las carencias que se tienen en este tipo de urbes en el conocimiento de temas relacionados con la contaminación del aire, no solo en Colombia, sino también en países emergentes de Latinoamérica. Carencias que se reflejan, por ejemplo, en la imposibilidad de comprender la dinámica de dispersión y transformación los contaminantes del aire y el impacto de sus fuentes de emisión sobre esta dinámica. Específicamente, este estudio pretende realizar un aporte al conocimiento en una ciudad donde no se tiene información sobre sus fuentes de emisión y donde nunca se ha realizado un ejercicio de modelización numérica mediante la aplicación de un modelo de transporte químico. Adicionalmente, esta investigación puede brindar bases para su aplicación en otras ciudades intermedias que experimenten problemas asociados a la contaminación del aire, o que por su rápido crecimiento, requieran políticas de prevención para evitar futuros episodios de contaminación atmosférica.

Los objetivos específicos del trabajo se abordaron de la siguiente forma en el documento:

***Objetivos 1 y 2: Elaborar el inventario de emisiones para fuentes móviles en ruta y estacionarias puntuales en Manizales. Desagregar espacial y temporalmente el inventario de emisiones.***

En el capítulo dos “Estimación del inventario de emisiones para la ciudad de Manizales”, se presentan los resultados obtenidos en la estimación del inventario de emisiones por fuentes móviles

en ruta y fuentes estacionarias puntuales en Manizales. Para fuentes móviles en ruta, se describe la aplicación del modelo internacional de emisiones (IVE), para obtener flujos totales anuales de contaminantes atmosféricos en la ciudad. Se muestran además los resultados obtenidos en la estimación de emisiones totales anuales de las principales fuentes estacionarias puntuales de la ciudad (asociadas a actividad industrial), a partir de información secundaria y la aplicación de factores de emisión. Finalmente, se presenta la aplicación de una metodología top-down para desagregar en alta resolución (1km x 1km y 1 h) las emisiones totales del inventario de emisión en Manizales.

***Objetivos 3 y 4: Incorporar la información de flujos de emisión de los contaminantes atmosféricos estimados, a las rutinas de simulación del modelo de transporte químico WRF-Chem. Establecer la configuración de dominios y esquemas del modelo que mejor se ajusten a las características de la zona de estudio.***

En el capítulo tres “Aplicación de modelización numérica para el estudio de la calidad del aire en Manizales”, se presentan los procedimientos llevados a cabo para incluir los flujos de emisión locales en el modelo WRF-Chem, utilizando la herramienta AAS4RWF. Se muestra además, el análisis de sensibilidad propuesto para definir la configuración del modelo (con base en las parametrizaciones físicas) que produce los mejores resultados en la representación de datos observados, tanto de variables meteorológicas (temperatura, humedad relativa y vientos), como de calidad del aire (ozono troposférico), teniendo en cuenta la disponibilidad de información horaria. Se incluye además, un análisis comparativo para evaluar la representatividad del modelo al utilizar inventarios globales en una simulación de alta resolución, como la propuesta para Manizales.

***Objetivo 5: Realizar simulaciones para un periodo seco con el fin de evaluar la dinámica de transporte, dispersión y concentraciones de los contaminantes  $O_3$ ,  $PM_{10}$  y  $SO_2$ , asociados a las emisiones antrópicas y volcánicas, y la influencia de la meteorología sobre Manizales.***

El análisis de los patrones de dispersión de los contaminantes evaluados y el estudio del impacto relativo de las fuentes de contaminación antropogénicas y volcánicas, se discute en el capítulo tres. Los resultados se dividen en dos secciones. En una primera parte, se analiza el impacto de las fuentes móviles en ruta y estacionarias puntuales sobre la dinámica de formación y transporte de ozono troposférico y material particulado ( $PM_{10}$ ). La segunda parte muestra los resultados obtenidos al incluir emisiones de dióxido de azufre provenientes del volcán Nevado del Ruiz y su efecto sobre las concentraciones de este contaminante en la ciudad de Manizales.

### ***Publicaciones***

Como se mencionó previamente, la mayor parte de los resultados de este trabajo están consignados en artículos dirigidos a la comunidad científica. Los artículos elaborados y relacionados con la presente investigación fueron:

#### ***Artículos publicados:***

- **González, C.M.**, Gómez, C.D., Rojas, N.Y., Acevedo, H., Aristizábal, B.H., 2017. Relative impact of on-road vehicular and point-source industrial emissions of air pollutants in a medium-sized Andean city. *Atmos. Environ.* 152, 279-289.
- Cuesta, A.P., **González, C.M.**, Velasco, M., Aristizábal, B.H., 2017. Distribución espacial de concentraciones de  $SO_2$ ,  $NO_x$  y  $O_3$  en el aire ambiente de Manizales. Manuscrito aceptado en la Revista Internacional de Contaminación Ambiental.

*Manuscritos sometidos a evaluación:*

- Gómez, C.D., **González, C.M.**, Osses, M., Aristizábal, B.H. Spatial and temporal disaggregation of the on-road vehicle emission inventory in a medium-sized Andean city. Comparison of GIS-based top-down methodologies. Manuscrito en proceso de evaluación en la revista Atmospheric Environment.
- **González, C.M.**, Ynoue, R.Y., Vara-Vela, A., Rojas, N.Y., Aristizábal, B.H. High-resolution air quality modeling in a medium-sized city in the tropical Andes: assessment of local and global emissions in understanding ozone and PM<sub>10</sub> dynamics. Manuscrito en proceso de evaluación en la revista Atmospheric Pollution Research.

*Pasantías de investigación*

- Durante el transcurso de la formación doctoral, se realizaron dos pasantías de investigación. La primera durante los meses de febrero y marzo del año 2013 en el Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE, en Brasil, bajo la dirección de la profesora Dr. Karla Maria Longo de Freitas, directora del Grupo de Modelagem da Atmosfera e Interfaces – GMAI. Durante la visita se adquirieron los conocimientos generales en el uso del modelo euleriano de transporte químico CCAT-BRAMS.
- Durante los meses de marzo y noviembre del 2016, se realizó una segunda pasantía de investigación en el Instituto de Astronomía, Geofísica y Ciencias Atmosféricas de la Universidad de Sao Paulo, Brasil, bajo la dirección de la profesora Dr. Rita Yuri Ynoue, codirectora del grupo de investigación LaPat. Durante este periodo se adquirió experiencia en el manejo del modelo euleriano de transporte químico WRF-Chem, para su aplicación sobre la ciudad de Manizales.

*Apoyo a la formación científica*

Como apoyo a este trabajo, se realizó una investigación a nivel de maestría en el tema de desagregación de inventarios de emisión. Se participó en la codirección del trabajo, así como en la elaboración de un artículo científico (incluido en el capítulo 2, sección 2.5.2). La tesis de maestría tiene como título:

- Gómez, C.D., 2017. Desagregación espacial y temporal del inventario de emisiones por fuentes antropogénicas para la ciudad de Manizales, Colombia. Tesis de Maestría. Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales.

*Proyecto conjunto con la Corporación Ambiental, CORPOCALDAS*

Otro de los puntos importantes de la presente investigación, fue su articulación con proyectos de cooperación entre el grupo de investigación GTAIHA de la Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales y la Corporación Autónoma Regional de Caldas, CORPOCALDAS. Como parte del trabajo conjunto entre las dos entidades se realizó el Convenio No. 130-2014 titulado: “Apoyo y fortalecimiento de la red de monitoreo de calidad del aire en la ciudad de Manizales y cuantificación de emisiones atmosféricas por fuentes móviles”. Este Convenio, ejecutado entre el 06 de octubre de 2014 al 09 de junio de 2016, permitió entre otros, la elaboración del inventario de emisiones por fuentes móviles en ruta y estacionarias puntuales para la ciudad de Manizales.

### ***Generación de conocimiento en otros temas relacionados con la contaminación atmosférica***

Durante el transcurso de la formación doctoral se realizó un aporte a las actividades investigativas del grupo, participando en la publicación de artículos científicos en otros temas relacionados con la contaminación atmosférica:

- Cortés J, **González CM**, Morales L, Abalos M, Abad E, Aristizábal BH, 2014. PCDD/PCDF and dl-PCB in the ambient air of a tropical Andean city: Passive and active sampling measurements near industrial and vehicular pollution sources. *Science of the Total Environment*, 491-492; 67-74.
- **González CM**, Cortés J, Aristizábal BH, 2015. Influence of meteorology and source variation on airborne PM<sub>10</sub> levels in a high relief tropical Andean city. *Revista Facultad De Ingeniería*, 74; 200-212.
- Cortés J, **González CM**, Arias AV, Orozco M, Aristizábal BH, 2015. Capítulo de libro: Análisis de datos de calidad del aire en la ciudad de Manizales utilizando MatLab y OpenAir. ISBN: 978-958-775-282-3 ed.: Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales. p.73 – 109.
- Cortés, J., Cobo, M., **González, C.M.**, Gómez, C.D., Abalos, M., Aristizábal, B.H., 2016. Environmental variation of PCDD/Fs and dl-PCBs in two tropical Andean Colombian cities using passive samplers. *Science of the Total Environment* 568, 614–623.

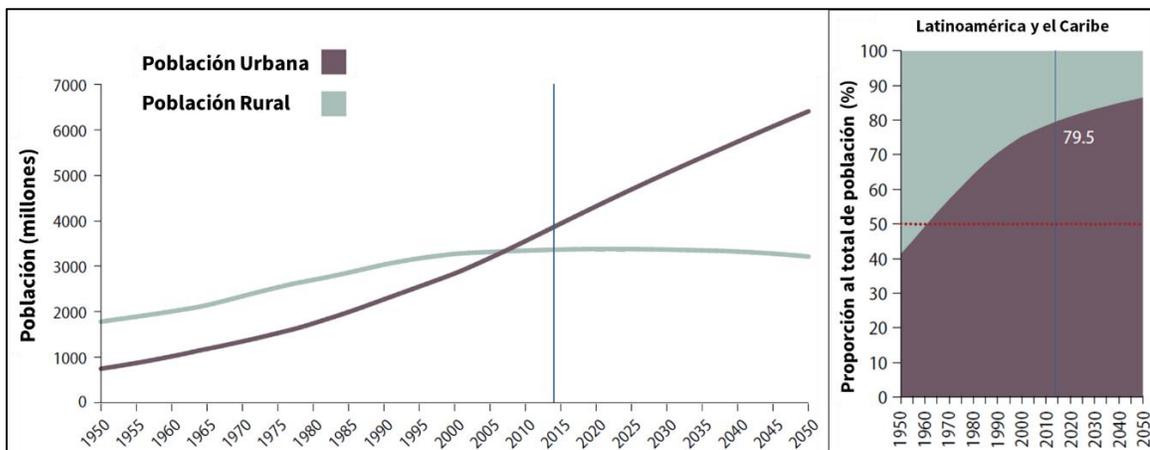


# CAPÍTULO 1

## INTRODUCCIÓN Y PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Durante los últimos años se ha incrementado la preocupación por las consecuencias que acarrearán los problemas de contaminación atmosférica, tanto por los efectos adversos sobre la población humana, como por la relación existente entre las emisiones de contaminantes y su impacto sobre el medio ambiente y el clima global (Seinfeld y Pandis, 2006; MAVDT, 2010a). Según la Organización Mundial de la Salud, OMS (WHO por sus siglas en inglés), la contaminación del aire representa el mayor riesgo ambiental para la salud. Se estima que durante el año 2012 una de cada nueve muertes fue el resultado de precarias condiciones del aire, de estas muertes, aproximadamente 3 millones son atribuibles únicamente a contaminación del aire en exteriores (WHO, 2016).

Durante la última década la población mundial ha sido predominantemente urbana (Figura 1.1). En 2014, Latinoamérica fue una de las regiones con mayor porcentaje de población urbana en el mundo (79.5%), solo inferior a Norteamérica con 81.5%. En el caso de Colombia, para 2014 el porcentaje de población que habitaba en zonas urbanas fue de 76% (UN, 2014). El crecimiento demográfico en las ciudades trae consigo un aumento en las actividades industriales, mayores índices de motorización, e incrementos en el consumo de combustibles y recursos naturales no renovables. Estas actividades son generadoras de mayores emisiones de contaminantes del aire, problemática que es más acentuada en países emergentes o con economías en desarrollo, como es el caso de los países de América Latina (Franco, 2012). Este fenómeno no está asociado únicamente a grandes ciudades, los centros urbanos pequeños con poblaciones menores a 1 millón de habitantes, se han caracterizado por un rápido crecimiento en sus niveles de urbanización (UN, 2014), generando una amenaza latente en estas ciudades donde el conocimiento de temas relacionados con contaminación atmosférica es limitado.



**Figura 1.1. Población urbana y rural en el mundo desde 1950 y proyección a 2050. El porcentaje de población urbana y rural en Latinoamérica y el Caribe se muestra a la derecha. Tomada y adaptada de UN, 2014.**

En Colombia, la contaminación atmosférica se ha constituido en uno de los principales problemas ambientales. El deterioro de la calidad del aire en las ciudades ha propiciado que se incrementen los efectos negativos sobre la salud humana y el medio ambiente, generando los mayores costos sociales y ambientales después de los generados por la contaminación del agua y los desastres naturales (CONPES 3344, 2005; MAVDT, 2010a). Según el documento CONPES 3550 (2008), las malas condiciones de la calidad del aire en exteriores son responsables de 6000 muertes y 7400 nuevos casos de bronquitis crónica al año.

Cifras más recientes publicadas por Golub et al. (2014), indican que los costos en salud asociados a contaminación del aire urbano en Colombia se han incrementado, pasando de 0.78% del PIB en 2002 a 1.12% en 2010. Sumado a esto, se estima que la contaminación del aire urbano fue responsable para el año 2010 de 5000 muertes prematuras, tres veces más que las asociadas a las malas condiciones de agua, saneamiento e higiene; y 5 veces más que las muertes asociadas a contaminación del aire intramural (Golub et al., 2014).

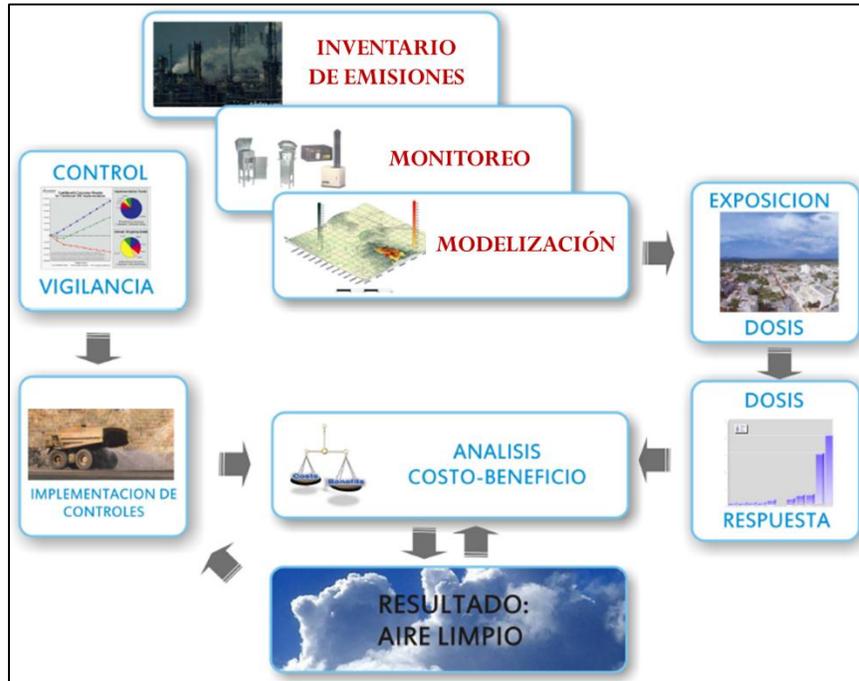
Colombia no es ajena a la problemática de la contaminación atmosférica y cambio climático, y en este sentido se han establecido una serie de políticas y protocolos para el estudio y regulación de estos problemas ambientales, aspecto en el cual se incluye no solo a las corporaciones autónomas regionales sino también a las universidades del país. El gobierno colombiano estableció en 2010 la Política de Prevención y Control de la Contaminación del Aire, cuyo enfoque es impulsar la gestión de la calidad del aire en el corto, mediano y largo plazo, con el fin de alcanzar los niveles de calidad del aire adecuados para proteger la salud y el bienestar humano (MAVDT, 2010a). Como parte de esta política, se adoptó el Protocolo para el Monitoreo y Seguimiento de la Calidad del Aire mediante la Resolución 650 de 2010 (MAVDT, 2010b). Este protocolo establece los lineamientos a seguir para la elaboración de Planes de Gestión de la Calidad del Aire (PGCA) (MAVDT, 2009).

Como lo establece el Protocolo para el Monitoreo y Seguimiento de la Calidad del Aire, estudios relacionados con la calidad del aire y la posterior conformación de PGCA tienen como base inicial tres elementos fundamentales: 1) Elaboración de inventarios de emisión (IE). 2) Medición y vigilancia de los contaminantes atmosféricos. 3) Modelización de la calidad del aire.

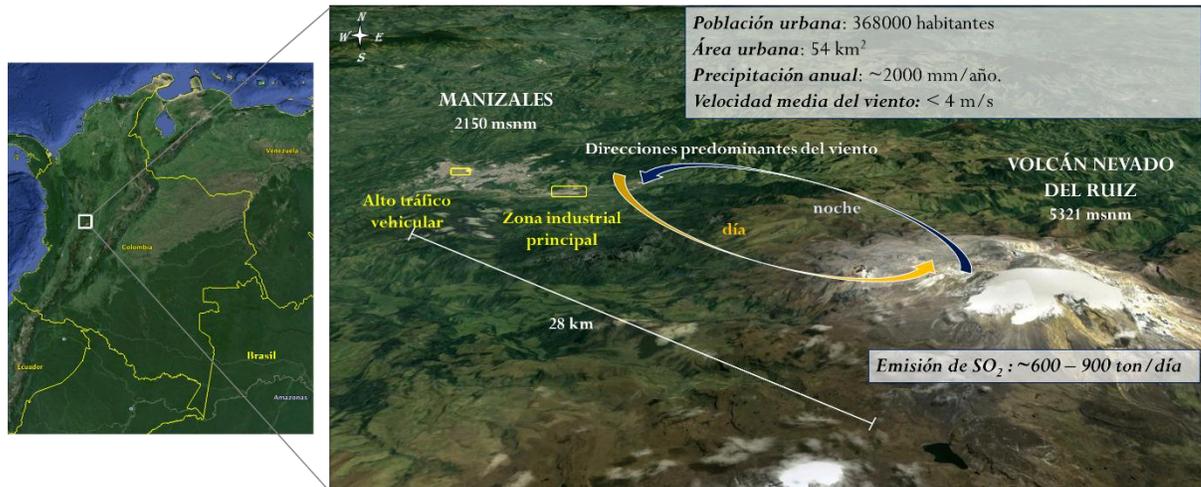
Como se muestra en la Figura 1.2, el desarrollo de estos componentes permite llevar a cabo estudios de exposición y estrategias que permitan evaluar posibles escenarios futuros de emisión. Estos temas son de importancia para realizar análisis costo-beneficio de las implicaciones que tienen los fenómenos de contaminación del aire urbano sobre la población y la economía de las ciudades. Con estos insumos, se generan bases sólidas para implementar estrategias y mecanismos de control. Se destaca finalmente que todos estos temas requieren de una participación activa de todos los sectores de la ciudad, especialmente la ciudadanía, para permitir una gobernanza de la calidad del aire y la adecuada implementación de los Planes de Gestión de Calidad del Aire.

Sumado a las consideraciones descritas, se destaca la importancia de estudiar la calidad del aire teniendo en cuenta el comportamiento meteorológico. Las condiciones meteorológicas son uno de los factores principales en el transporte, acumulación y transformación de contaminantes del aire. La influencia de los vientos en la dispersión de contaminantes (a escala local, regional y sinóptica) y el impacto en la cinética fotoquímica causada por la radiación solar, son algunos ejemplos de fenómenos que afectan los niveles y el destino de contaminantes atmosféricos primarios y secundarios. Asimismo, la meteorología puede ser influenciada por las especies químicas emitidas a la atmósfera, con efectos en el balance radiativo y cambios en la microfísica de las nubes (Seinfeld y Pandis, 2006; Grell y Baklanov, 2011; Stuefer et al., 2013). Por lo tanto, la meteorología es un factor clave en la comprensión de los procesos de dispersión y transformación de contaminantes atmosféricos y su posible efecto sobre centros poblados. Son de especial interés en Colombia las urbes localizadas en zonas de alta montaña, representada por los tres ramales de la cordillera de los

Andes. Estos son sistemas de alta complejidad por la formación de climas locales y regionales, su alta variabilidad climática y su topografía compleja (Poveda, 2004; Huggel et al., 2015). Dentro de este sistema montañoso se ubica el municipio de Manizales, capital del departamento de Caldas (Figura 1.3).



**Figura 1.2. Componentes de un Plan de Gestión de Calidad del Aire (PGCA). Tomada de MAVDT, 2009.**



**Figura 1.3. Ubicación de Manizales sobre la vertiente occidental de la Cordillera Central de los Andes. Características generales de la ciudad. Fuente del mapa base: Google Earth.**

Manizales es una ciudad intermedia andina con una población proyectada a 2015 de 368000 habitantes (cabecera municipal) y un área urbana aproximada de 54 km<sup>2</sup>. A pesar de ser una urbe pequeña, algunas características particulares de la ciudad podrían favorecer episodios de contaminación con potencial impacto sobre la población y ecosistemas naturales. La ciudad se

caracteriza por un área limitada para su expansión urbana en una zona de topografía compleja, producto de su ubicación sobre la vertiente occidental de la Cordillera Central de los Andes a 2150 msnm. Esta característica conlleva a una alta densidad poblacional (~6800 habitantes/km<sup>2</sup> en la zona urbana).

La influencia de fuentes de emisión antropogénicas en la calidad del aire de Manizales es caracterizada por la presencia de fuentes estacionarias de tipo industrial, con empresas principalmente en el sector de alimentos, siderurgia, metalurgia e incineración de residuos. Asimismo, la presión que ejercen las fuentes móviles en ruta se ve reflejada en el aumento del parque automotor durante los últimos años, destacándose principalmente un crecimiento en el número de vehículos particulares y motos, que registraron incrementos entre 2009 y 2016 del 77% y 150% respectivamente (Manizales Como Vamos, 2017). Este fenómeno se ve caracterizado en una alta densidad de vehículos por habitante en Manizales, índice que pasó de 202 vehículos por cada 1000 habitantes en 2009 a 398 vehíc./1000 hab. en 2016. Al comparar los índices de motorización con otras ciudades del país, Manizales reportó para el año 2016 un índice superior al registrado en ese año por ciudades como Bogotá (198 vehíc./1000 hab.), Medellín (337 vehíc./1000 hab.), Cali (323 vehíc./1000 hab.) y Pereira (338 vehíc./1000 hab.) (Manizales Como Vamos, 2017). Finalmente, la influencia de fuentes naturales de contaminación como el volcán Nevado del Ruiz, localizado a 28 km de la ciudad, el cual ha registrado actividad importante desde el año 2010 con emisiones diarias de gases azufrados y diferentes episodios de emisión de cenizas (Cortés et al, n.d.).

En términos climáticos, Manizales se caracteriza por una variación de la temperatura diurna entre los 12 y 24 °C, así como una precipitación anual elevada (~2000 mm/año) con alta variabilidad espacial asociada a la presencia de microclimas (Cortés, 2010). Además, las bajas velocidades del viento que se registran en el área urbana, inferiores a 4 m/s, podrían generar una mínima dispersión de contaminantes. A pesar de que la ciudad cuenta con una red de estaciones meteorológicas robusta que ha brindado información sobre las variables meteorológicas principales durante la última década, no hay una comprensión clara sobre cómo los fenómenos meteorológicos locales influyen los procesos de dispersión o acumulación de contaminantes en la zona.

Los factores descritos anteriormente exhiben la necesidad de estudios sobre la calidad del aire en esta región del país. Los estudios sobre contaminación atmosférica realizados durante los últimos años en Manizales se han enfocado principalmente al seguimiento de material particulado en aire ambiente sobre la zona urbana (González, 2012; González et al., 2015; Velasco, 2015), el seguimiento del fenómeno de precipitación ácida, uno de los efectos principales de la contaminación atmosférica (Vélez et al., 2010; González y Aristizábal, 2012), y el estudio de la contaminación por compuestos orgánicos persistentes (COPs) en aire ambiente, principalmente dioxinas y furanos (Aristizábal et al., 2011; Cortés et al., 2014; 2016). En general, dichos estudios sugieren la influencia de fuentes antropogénicas (de tipo vehicular principalmente) en el deterioro de la calidad del aire en Manizales, por ejemplo, sobre los niveles de PM<sub>10</sub> en la zona del centro histórico (principalmente en el sector de fundadores), donde predominan las mayores concentraciones de este contaminante con un promedio anual reportado para el año 2016 de 36 µg/m<sup>3</sup> (Velasco, 2016). A pesar de que las concentraciones de este contaminante no superan la norma anual colombiana, establecida en 50 µg/m<sup>3</sup> por la Resolución 610 de 2010 (MAVDT, 2010c), todas las estaciones de monitoreo en la ciudad reportan valores superiores al límite anual recomendado por la OMS de 20 µg/m<sup>3</sup> para PM<sub>10</sub> (WHO, 2006).

Manizales ha avanzado de manera significativa en el estudio de la contaminación atmosférica, sin embargo, es clara la necesidad de ahondar en temas relacionados con la cuantificación de las emisiones de contaminantes atmosféricos y sus impactos sobre la calidad del aire. Asimismo, hay carencias en el seguimiento de otros contaminantes de interés, como el ozono troposférico (O<sub>3</sub>) y dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>); poniendo de manifiesto las deficiencias actuales y la imposibilidad de

obtener un conocimiento profundo y realista sobre la dinámica de la contaminación atmosférica en la región y zonas aledañas. Estudios que permitan analizar a fondo el comportamiento de los principales contaminantes del aire en la región, el impacto de las fuentes de contaminantes y el papel de la meteorología sobre la calidad del aire, aportarán conocimiento y herramientas importantes hacia la realización de una adecuada gestión y gerencia de la calidad del aire en el municipio. En este sentido, estudios recientes han señalado la necesidad de utilizar modelos de transporte químico como herramienta para comprender la dinámica e impacto de las fuentes de contaminantes atmosféricos sobre Manizales (González, 2012; González y Aristizábal, 2012).

La modelización atmosférica y de calidad del aire se establece como una herramienta fundamental para la investigación y entendimiento de los procesos de dispersión, transformación y deposición de contaminantes atmosféricos. La adecuada implementación de modelos de calidad del aire permite además la evaluación de escenarios de emisiones, insumo de gran utilidad para la generación de estrategias y políticas encaminadas a reducir el impacto generado por las distintas fuentes de contaminantes atmosféricos (Zárate et al., 2007; Freitas et al., 2009).

Anteriormente, el estudio y predicción de la química y el tiempo atmosférico se estudiaban por separado mediante el uso de modelos *off-line*, en los cuales el modelo meteorológico se utiliza de forma independiente para generar campos meteorológicos como información de entrada para el modelo de transporte químico, lo cual es computacionalmente más atractivo. Sin embargo, la separación de la meteorología y la química puede ocasionar una potencial pérdida de información sobre procesos atmosféricos tales como cambios en la velocidad y dirección de los vientos, variaciones en la altura de la capa límite planetaria (PBL por sus siglas en inglés), formación de nubes y precipitación; efectos que pueden ser más marcados cuando se realizan simulaciones con una resolución horizontal alta, del orden de 1 km (Grell et al., 2005; Grell y Baklanov, 2011).

Gracias a los avances computacionales durante la última década, modelos de transporte químico de tipo euleriano tridimensional se han utilizado en diferentes zonas del mundo para el estudio de la química y la meteorología de la atmósfera, tanto a escala regional como local (Longo et al., 2013). Asimismo, el acoplamiento de la predicción del tiempo atmosférico con los procesos químicos en la atmósfera, ha permitido la conformación de sistemas de modelización unificados que permiten interacciones entre la química y la meteorología. Estos modelos eulerianos de transporte químico, denominados modelos *on-line*, presentan algunas ventajas sobre otros modelos de tipo lagrangiano o modelos eulerianos *off-line* (Grell et al., 2005; Grell y Baklanov, 2011; Stuefer et al., 2013):

- Los modelos eulerianos representan la clase más sofisticada de modelos atmosféricos, su aplicación resulta más conveniente cuando existen patrones complejos de emisión (por ejemplo, numerosas y diversas fuentes de emisión dispersas en un área geográfica amplia) y/o cuando los procesos de transformación química juegan un papel relevante en la generación y destino de los contaminantes (por ejemplo, para contaminantes secundarios).
- La aproximación *on-line* en los modelos eulerianos permite una representación más realista de los procesos físicos y químicos en la atmósfera, debido a la interacción que se da entre la química y la meteorología.
- Los errores de una aproximación *off-line* se incrementan a resoluciones altas (por ejemplo 1 km).
- Para predicciones de calidad del aire, la aproximación *on-line* es numéricamente más consistente, no se requiere interpolación en tiempo y espacio.

La modelización de calidad del aire, empleando modelos de transporte químico que permitan un acople en línea de la meteorología y la química atmosférica, se constituye en una herramienta

importante para la realización de estudios enfocados a la determinación de los impactos de las emisiones atmosféricas y la dinámica de los contaminantes del aire asociada al comportamiento meteorológico (Toro et al., 2006; Longo et al., 2013). La correcta modelización de la calidad del aire es una tarea compleja, que implica además la realización de actividades previas, tales como la estimación del inventario de emisiones, su desagregación espacial y temporal, y el monitoreo continuo de contaminantes atmosféricos y variables meteorológicas. No obstante, su aplicación se constituye en un paso fundamental en la comprensión de los fenómenos asociados a la contaminación atmosférica y la conformación de PGCA, enfocados a reducir o prevenir el impacto de fuentes de contaminantes atmosféricos sobre la salud y el medio ambiente.

Son pocos los estudios que se tienen actualmente en Colombia relacionados con el uso de modelos numéricos que permitan analizar el impacto de las diversas fuentes de emisión de contaminantes atmosféricos, los procesos de dispersión y la interacción entre la química de la atmósfera y la meteorología. Algunos ejemplos exitosos donde se han comenzado a implementar modelos de calidad del aire en el estudio de la contaminación atmosférica, se extienden a ciudades con población superior a 4 millones de habitantes como Medellín y Bogotá. En Medellín se han utilizado modelos de transporte químico como el MEMO-MUSE y RAMS-CAMx en el estudio de la dinámica de formación de  $O_3$  (Toro et al., 2006; Marín, 2009). En Bogotá se han evaluado modelos como el FVM-TAPOM (Zárate et al., 2007), y recientemente modelos de transporte químico *on-line* como el CCAT-BRAMS evaluando la contaminación por monóxido de carbono (CO) (Rincón, 2015), así como el WRF-CMAQ (Nedbor-Gross et al., 2014; 2017) y WRF-Chem (Kumar et al., 2014; 2016) en el estudio de contaminantes como  $PM_{10}$  y  $O_3$ . En estas ciudades se ha avanzado de manera significativa en intentar acoplar la información de los inventarios de emisión locales y su uso en modelos de contaminación atmosférica. Se ha logrado además, integrar los esfuerzos de la academia y las corporaciones autónomas regionales en el estudio de la calidad del aire. Sin embargo, el uso de modelos de última generación para el estudio de la contaminación atmosférica en ciudades intermedias de Colombia no ha sido abordado de forma profunda, en especial en zonas de alta montaña como Manizales, donde la modelización es un reto aún mayor, debido a las condiciones de terreno complejo y la necesidad de una alta resolución espacial.

Teniendo en cuenta que en la ciudad hay carencias en temas que son necesarios no solo para la aplicación de modelos de calidad del aire, sino también para una adecuada gestión ambiental del recurso aire en el municipio, el problema que se plantea en esta investigación tiene como fundamento los siguientes componentes y preguntas:

En el contexto local, se destaca que la ciudad de Manizales no cuenta con un inventario de emisión consolidado para fuentes antropogénicas. Sumado a esto, el conocimiento de niveles de contaminación en el aire ambiente de Manizales solo se extiende al monitoreo de material particulado ( $PM_{10}$  principalmente). Con base en esta problemática, se plantean las siguientes preguntas de investigación:

1. ¿Cuál es la contribución relativa de las fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales a las emisiones de contaminantes criterio, compuestos orgánicos volátiles y gases efecto invernadero?
2. ¿Cómo se distribuyen, en tiempo y espacio, las emisiones por fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales sobre el área urbana de la ciudad?
3. ¿Cuáles son los niveles de concentración en aire ambiente de otros contaminantes de importancia como el  $O_3$  y  $SO_2$ ?

Con los insumos obtenidos en respuesta a las preguntas anteriores, se podría realizar en la zona de estudio un ejercicio inicial de simulación atmosférica aplicando un modelo euleriano de transporte

químico. En el contexto global, la implementación de este tipo de modelos es un tema de gran interés para la comunidad científica. Este estudio podría ser útil para otras ciudades intermedias de Latinoamérica en la implementación de sistemas de simulación para la comprensión de fenómenos asociados a la contaminación atmosférica, el impacto de sus fuentes de emisión y la evaluación de escenarios de emisión. Sumado a esto, la ciudad de Manizales presenta un reto importante para la simulación debido a factores como el reducido tamaño del área urbana (~54 km<sup>2</sup>), lo que hace necesario el uso de una alta resolución en la simulación (por ejemplo 1 km de espaciamiento de grilla). Las características de topografía compleja, en una ciudad que se ubica en la vertiente occidental de la Cordillera Central a una altitud media de 2150 msnm, a solo 28 km (en distancia horizontal) del punto más alto de la Cordillera en la cima del volcán Nevado del Ruiz, a 5321 msnm. Adicionalmente, en el área urbana de Manizales se presentan variaciones topográficas importantes, como lo demuestran las pendientes promedio de 8% (Escobar y Garcia, 2012), que dan cuenta de la compleja topografía de la zona urbana.

El uso de este tipo de modelos permitiría un análisis más profundo en temas como la química de formación de un contaminante secundario de gran importancia como el O<sub>3</sub>, y la dinámica de dispersión de contaminantes primarios como SO<sub>2</sub> y PM<sub>10</sub>. Asimismo, podría generar bases para analizar el impacto relativo de las fuentes de emisión antropogénicas en la formación de los contaminantes mencionados. Sumado a esto, no hay estudios en la ciudad que expliquen cual es la contribución de las emisiones provenientes del volcán Nevado del Ruiz a la calidad del aire por SO<sub>2</sub>. Los resultados pueden brindar bases para sugerir la posible influencia de emisiones volcánicas en la generación de fenómenos de contaminación como la lluvia ácida, identificado previamente en la ciudad (Vélez et al., 2010; González y Aristizábal, 2012). Como se menciona anteriormente, mediante este trabajo se pretende generar un soporte metodológico y científico que pueda ser replicado en otras ciudades intermedias de Colombia y Latinoamérica. Tanto para ciudades con influencia de fuentes de emisión antropogénicas, como para aquellas que tengan influencia de fuentes de emisión volcánica. Por ejemplo, algunas ciudades de países como Colombia, Chile, México, Ecuador y Bolivia se encuentran localizadas en zonas de influencia volcánica. Teniendo en cuenta estos aspectos, se plantean las siguientes preguntas de investigación:

4. ¿Cuál sería la configuración y esquemas de parametrización más adecuados en el modelo de transporte químico WRF-Chem para representar la dinámica del O<sub>3</sub>, contaminante útil en la evaluación inicial de este tipo de modelos?
5. ¿La utilización de un modelo euleriano de transporte químico sobre una ciudad intermedia como Manizales, permitirá determinar el impacto relativo de las fuentes de emisión locales sobre la calidad del aire?
6. ¿Utilizando un modelo euleriano de transporte químico, es posible determinar el impacto relativo de las emisiones volcánicas de SO<sub>2</sub> sobre las concentraciones de este contaminante en el área urbana?

Finalmente, teniendo en cuenta las deficiencias que se tienen en ciudades intermedias en la estimación de sus inventarios de emisión, y las complejidades inherentes a estos procedimientos; este estudio busca generar un soporte científico que justifique la necesidad de la estimación de los inventarios de emisión locales, a la hora de realizar ejercicios de simulación de calidad del aire con modelos de transporte químico. Se propone entonces responder la pregunta:

7. ¿El uso del inventario de emisión local marca una diferencia importante en los resultados de simulación de calidad del aire, al compararlos con aquellos obtenidos a partir de la utilización de inventarios globales?

A partir de las preguntas de investigación propuestas, se plantea de forma general la siguiente **hipótesis de investigación**:

La aplicación de un modelo euleriano de transporte químico *on-line*, permitirá un estudio realista de la dinámica e impacto relativo de fuentes antrópicas y naturales sobre niveles de contaminantes de importancia en Manizales, como los son el ozono troposférico, material particulado (PM<sub>10</sub>) y dióxido de azufre. El uso de este tipo de modelos con información de emisiones locales, permitirá establecer que las fuentes de emisión antropogénicas producto de actividad vehicular generan los mayores niveles de los contaminantes PM<sub>10</sub> y O<sub>3</sub> principalmente en la zona centro de la ciudad de Manizales. Los mayores niveles de estos contaminantes son influenciados por la baja velocidad del viento y los ciclos diurnos de la capa límite planetaria (PBL). A escala regional, las emisiones de dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>) derivadas de actividad volcánica, son una causa importante en los niveles de concentración de SO<sub>2</sub> sobre el área urbana de Manizales. La dispersión de las emisiones volcánicas está influenciada por los movimientos de masas de aire con dirección predominante hacia Manizales, siendo entonces los precursores principales de fenómenos como la precipitación ácida.

Teniendo en cuenta los planteamientos previos, esta investigación pretende entonces realizar un aporte al estudio de la contaminación atmosférica mediante la aplicación de modelización numérica. El cumplimiento del **objetivo general**: “*Explicar la dinámica de la contaminación del aire y determinar la importancia de las fuentes de contaminación (antrópicas y naturales) y la meteorología sobre la contaminación del aire en Manizales*”, se fundamenta en el esquema mostrado en la Figura 1.4, donde se identifican los objetivos específicos propuestos.

A partir de la utilización del modelo euleriano de transporte químico *on-line*, WRF-Chem, se propone estudiar la dinámica e impacto de las emisiones antropogénicas (fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales) y emisión de gases azufrados (provenientes del volcán Nevado del Ruiz) sobre el municipio de Manizales. Al ser este es el primer ejercicio de simulación atmosférica y de calidad del aire sobre la ciudad, se plantea la realización de la modelización en un periodo seco. Lo anterior con el fin de evitar las dificultades adicionales que se presentan al evaluar periodos con presencia de lluvia, dificultades asociadas a la simulación de variables como la altura de capa límite y la precipitación (Liu et al., 2012; Jiménez, 2016; Tian et al., 2017). El proceso de selección de la configuración del modelo que mejor represente las condiciones meteorológicas y de calidad del aire, se basará en comparación de los datos observados y simulados para variables meteorológicas principales como temperatura, humedad relativa y vientos (dirección y velocidad). En términos de calidad del aire, el enfoque se basará principalmente en los resultados obtenidos para el O<sub>3</sub>, teniendo en cuenta la disponibilidad de datos horarios producto del monitoreo de este contaminante, a diferencia de PM<sub>10</sub>, en el cual se tiene información diaria con registros cada tres días. La comparación con los resultados obtenidos para material particulado y SO<sub>2</sub> se realizará de forma adicional pero no influirá en los procedimientos iniciales de calibración y ajuste del modelo.



**Figura 1.4. Componentes y objetivos específicos necesarios para llevar a cabo la simulación de calidad del aire en Manizales utilizando el modelo euleriano de transporte químico WRF-Chem.**

Los resultados de esta investigación pueden ser un insumo importante hacia la generación de políticas de control y prevención de la contaminación atmosférica y la conformación de un PGCA en la ciudad. Además de contribuir con la generación de conocimiento en una zona donde el tema de modelización atmosférica no ha sido explorado, esta investigación pretende generar un soporte científico que sirva como base para otras ciudades de Colombia y Latinoamérica en el estudio de la contaminación del aire.



# CAPÍTULO 2

## ESTIMACIÓN DEL INVENTARIO DE EMISIONES PARA LA CIUDAD DE MANIZALES

---

### 2.1. GENERALIDADES SOBRE INVENTARIOS DE EMISIÓN

Diferentes estudios son claros al afirmar que la obtención de resultados óptimos mediante la aplicación de modelos de transporte químico, depende en gran parte de una correcta elaboración de los inventarios de emisión en la zona de estudio y de una óptima desagregación espacial y temporal de los mismos (Vivanco y Andrade, 2006; Zárate et al., 2007; Peñalosa, 2010). Según Freitas et al. (2011), los inventarios de emisiones proveen flujos máxicos a nivel de superficie y en niveles verticales superiores para la solución de la ecuación de continuidad de masa (MCE por sus siglas en inglés). Esta información es crucial en el estudio de la química atmosférica mediante modelos de transporte químico. En términos de conformación de PGCA, el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC, 2005) establece que los inventarios de emisión permiten identificar tanto las fuentes como su contribución a la problemática de contaminación del aire, constituyéndose este en el primer paso hacia la gestión de calidad del aire.

Un inventario de emisión (IE) es una base de datos que contiene la cantidad de contaminantes del aire emitidos a la atmósfera en una determinada zona (a escala local, regional o global), durante un periodo específico de tiempo y debido a actividades de tipo antropogénico o natural (Parra et al., 2006). El primer paso en la realización de un IE es definir el propósito del mismo. Pulles y Heslinga (n.d.) definen dos objetivos principales: Inventarios con fines de regulación y políticas ambientales y aquellos con fines científicos. Este último es comúnmente utilizado como información de entrada a los modelos de calidad del aire con el objetivo de comprender los procesos físicos y químicos en la atmósfera y la influencia de los contaminantes del aire sobre este sistema.

Dos metodologías son empleadas en el cálculo de los inventarios: las metodologías Top-down y Bottom-up. Ambas comparten la misma estructura básica pero se diferencian en los datos de entrada, parámetros y suposiciones. Su selección depende de la información disponible y el grado de detalle que se quiere obtener con el inventario (Reynolds y Broderick, 2000). El uso de una u otra metodología no condiciona la correcta realización de un inventario, según Vivanco y Andrade (2006) los inventarios se pueden considerar consistentes cuando las estimaciones a partir de las metodologías Top-down y Bottom-up muestran resultados comparables.

La metodología Top-down plantea la obtención de las emisiones totales para un área específica con base en información general o agregada, por ejemplo, emisiones totales de una región con base en el consumo total de combustible, información de población entre otros. La desagregación de las emisiones totales a partir de esta metodología, dependerá de datos estadísticos que permitan distribuir las emisiones (por ejemplo, densidad de población e industrias, distribución de la red vial, densidad

de tráfico). De otra parte, la metodología Bottom-up construye el inventario a partir de información detallada y desagregada en el dominio, en función de los datos de actividad asociados a cada fuente (datos de aforo vehicular, longitud de vías y distribución de tecnologías vehiculares, descripción detallada de procesos y consumos en la industria, entre otros). Para esta metodología generalmente se utilizan modelos de emisiones (Zárate et al., 2007; Peñaloza 2010).

En Colombia, el gobierno ha publicado diferentes protocolos con el fin de brindar lineamientos para la realización de IEs en las diferentes ciudades. De forma general se especifica que una vez definido el propósito del inventario, se debe realizar una búsqueda de información secundaria y definir el método de cálculo de las emisiones. Existen diferentes métodos de estimación, que van desde la medición en la fuente (método directo) hasta la aplicación de métodos indirectos de estimación. La medición directa es comúnmente aplicada a fuentes estacionarias puntuales, mediante la realización de monitoreos de tipo isocinético o la instalación de equipos de monitoreo continuo. Para los casos en los cuales no se tienen los recursos técnicos y económicos para realizar mediciones directas, o casos en que la aplicación de métodos directos es compleja (como la estimación de emisiones vehiculares), el uso de métodos indirectos es una práctica común. En este grupo se encuentran métodos ampliamente utilizados como la aplicación de factores de emisión (FE), donde la emisión es estimada a partir de un valor representativo que relaciona la cantidad de un contaminante emitido a la atmósfera en función de una actividad asociada (Rojas, 2015). Según Lents et al. (n.d.), dos fuentes importantes con información de FE para diversos procesos son la base de datos AP-42 de la EPA (<https://www.epa.gov/chief>) y la IPCC (<http://www.ipcc-nggip.iges.or.jp/EFDB/main.php>). Los factores de emisión son aplicados también en el uso de modelos de emisiones, utilizados generalmente en la estimación de fuentes complejas como los aportes de actividad vehicular. Un resumen de las fuentes de información principales y métodos de cálculo empleados en la estimación de IEs se muestra en la Tabla 2.1.

**Tabla 2.1. Posibles fuentes de información y métodos de cálculo para elaboración de inventarios de emisión en Colombia (MAVDT, n.d.)**

<b>Fuentes de información</b>	
<i>Entidad</i>	<i>Tipo de información obtenida</i>
Autoridades Ambientales	Mapas cartográficos, licencias ambientales, descripción de actividad económica y proceso productivo.
Departamentos de tránsito y centros de diagnóstico automotor	Composición de la flota vehicular registrada, datos de aforo, información base para generar la distribución de tecnología vehicular
Planes de uso del suelo e información de Planes de movilidad	Cartografía, ubicación de centros industriales, mapas de red vial y rutas de transporte público
Encuestas generales	Datos de actividad: consumos de materia prima y combustibles en industrias, distancia recorrida por vehículos, perfiles de encendido y apagado de vehículos.
ANDI, Cámara de Comercio	Industrias existentes, actividad económica
<b>Métodos de cálculo</b>	
<i>Tipo</i>	<i>Información base</i>
Método directo	Medición en la fuente
Métodos indirectos	Modelos de emisión
	Factores de emisión
	Balances de masa
	Encuestas
	Extrapolación

Cuatro atributos o dimensiones principales deben ser definidos en función del propósito fundamental del IE. Como se observa en la Figura 2.1, se debe tener claro cuáles contaminantes estimar, su fuente de emisión, la región donde se cuantificarán y el intervalo de tiempo asociado no solo al año base de estimación sino también a su resolución temporal (Pulles y Heslinga, n.d.).

Es común en centros urbanos que los IE sean diseñados inicialmente para conocer los aportes de sus fuentes principales de emisión, como por ejemplo las fuentes móviles y estacionarias puntuales de tipo antropogénico. Según Gallardo et al. (2012), los inventarios de emisión actuales generados en las principales ciudades de Latinoamérica, permiten concluir que las emisiones derivadas del tráfico vehicular son responsables de 1/3 a 2/3 de las emisiones de partículas inhalables, y de la gran mayoría de emisiones de precursores de ozono ( $\text{NO}_x$  y VOC). En este sentido, en las zonas urbanas se busca inicialmente conocer los aportes asociados a la generación de contaminantes criterio (directamente implicados en episodios de contaminación local) y gases efecto invernadero, cuyo conocimiento ha tomado relevancia y es la base para el establecimiento de políticas y estrategias que buscan combatir y mitigar los efectos del cambio climático.

En términos de la dimensión espacial y temporal, los IE generalmente reportan sus emisiones sobre una base anual (ton/año) asociada a un año base definido y con una cobertura regional, por ejemplo las emisiones totales anuales de un área metropolitana o de una ciudad en particular. Sin embargo, si la utilización del IE busca además su aplicación con fines de evaluación de un modelo de calidad del aire, tanto la resolución espacial y temporal debe incrementarse, por ejemplo, con espaciamiento de celdas de 1km x 1km en el dominio y 1 h de resolución temporal.

## **2.2. ANTECEDENTES DE ELABORACIÓN DE INVENTARIOS DE EMISIÓN EN COLOMBIA Y SURAMÉRICA**

Las aglomeraciones urbanas (especialmente en países en vías de desarrollo) son una de las mayores fuentes de contaminación atmosférica a nivel regional y global (Tuia et al., 2007; Zárate et al., 2007; D'Angiola et al., 2010). Para el caso de Suramérica, se ha planteado la necesidad del cálculo de inventarios de emisión locales, los cuales son un complemento esencial de los inventarios de emisión globales. Debido a la baja resolución espacial y temporal de los inventarios globales, las características específicas de cada región no son representadas de forma adecuada, en especial en lo que respecta a los centros urbanos (Alonso et al., 2010). Esta característica impide un conocimiento detallado las principales fuentes de emisión así como de las zonas críticas asociadas a estas emisiones.

Ejemplos de algunos casos de estudio donde se realizaron inventarios de emisión en ciudades principales de Suramérica son presentados en la Tabla 2.2. A partir de estos estudios, se puede observar como la mayoría de inventarios se han enfocado en la cuantificación de emisiones generadas por fuentes móviles en ruta. Asimismo, los estudios presentados muestran un enfoque hacia la estimación de contaminantes criterio y VOC principalmente, seguido de los gases efecto invernadero (GHG por sus siglas en inglés) que son incluidos en los inventarios de algunas ciudades. Para el caso de Colombia, ciudades con poblaciones mayores a 4 millones de habitantes como Bogotá y Medellín, presentan los mayores avances en este campo.

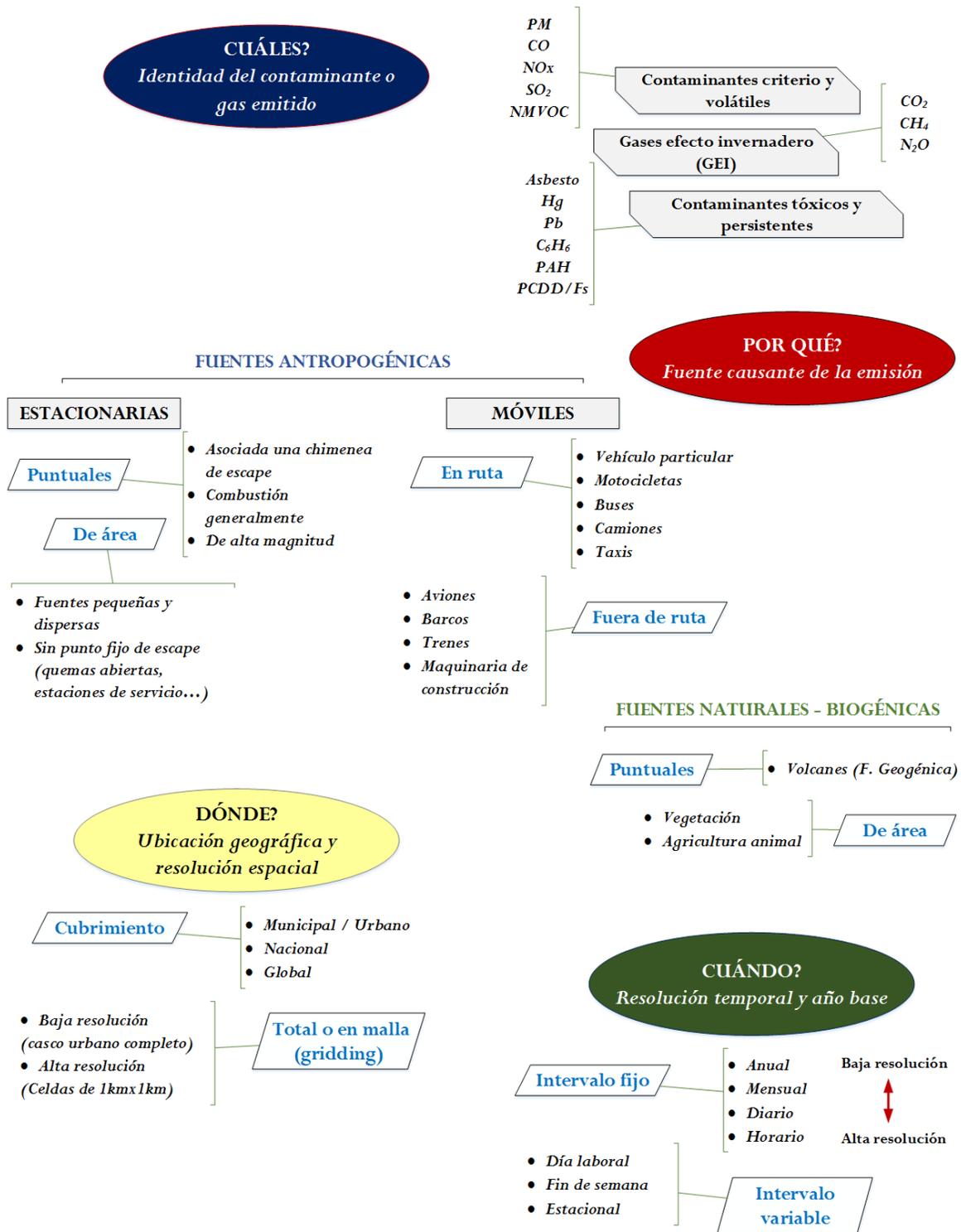


Figura 2.1. Dimensiones de un inventario de emisión y ejemplos de sus características. Elaboración propia a partir de información descrita por Pulles y Heslinga (n.d.).

**Tabla 2.2. Algunos casos de estudio en Suramérica donde se ha realizado el cálculo de inventarios de emisión a nivel local y regional.**

<b>Zona objeto de estudio</b>	<b>Características generales del inventario de emisiones</b>	<b>Fuentes de emisión</b>
<i>Suramérica</i>		
Santiago de Chile y Buenos Aires (Henríquez, 2007)	Se realiza el cálculo de emisiones para contaminantes criterio (CO, SO <sub>x</sub> , NO <sub>x</sub> , PM), VOC, acetaldehídos, formaldehídos y CO <sub>2</sub> . Se aplica la metodología y modelo IVE. Estimación de emisiones totales anuales (año base 2007) en Santiago de Chile y Buenos Aires, con resolución temporal horaria. No se reporta desagregación espacial	Fuentes móviles en ruta
Gran Concepción, Chile (ciudad intermedia) (Tuia et al., 2007)	Se presenta una metodología simplificada (Top-down) para determinar emisiones vehiculares en caliente y su respectiva distribución espacial utilizando sistemas de información geográfica (SIG). Se reportan emisiones para contaminantes criterio (CO, NO <sub>x</sub> , PM <sub>10</sub> ) y VOC.	Fuentes móviles en ruta
Ciudad de México, Santiago de Chile y Sao Paulo (Tolvett, 2009)	Se aplica la metodología IVE de Potencia Específica Vehicular para el cálculo y análisis de emisiones de vehículos diésel. No se reporta desagregación espacial. El análisis se realiza para los contaminantes CO, NO <sub>x</sub> , hidrocarburos totales (HCT), PM y CO <sub>2</sub> .	Fuentes móviles en ruta – Vehículos diésel.
Suramérica (Alonso et al., 2010)	Se realiza el cálculo de emisiones por fuentes móviles para Suramérica, mediante la integración de inventarios de emisión locales de las ciudades: Sao Paulo, Rio de Janeiro y Porto Alegre en Brasil; Buenos Aires (Argentina), Santiago (Chile), y Bogotá (Colombia). El inventario fue calculado para CO y NO <sub>x</sub> . Se realiza una extrapolación de emisiones en zonas urbanas teniendo en cuenta la correlación obtenida entre densidad vehicular y las emisiones por fuentes móviles evaluadas, generando un inventario regional con resolución de 20 km <sup>2</sup> y 5 km <sup>2</sup> . Esta desagregación se realizó con fines de modelización de calidad del aire.	Fuentes móviles en ruta.
Área metropolitana de Buenos Aires, Argentina (D'Angiola et al., 2010)	Se realiza un inventario de emisiones anual para contaminantes criterio (CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , PM), NMVOC y GHG (CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> y N <sub>2</sub> O). Las estimaciones fueron obtenidas mediante la técnica Bottom-up, aplicando la metodología COPERT. Se realiza desagregación espacial por distrito basada en la estimación para el año base 2006.	Fuentes móviles en ruta.
Bogotá, Buenos Aires, Santiago de Chile y Sao Paulo (Gallardo et al., 2012)	Se evalúan diferentes estimados de emisiones de CO y NO <sub>x</sub> reportados en estudios previos para ciudades principales de Suramérica, con respecto a observaciones realizadas y sus picos de concentración. La evaluación se realiza a partir de los inventarios desagregados en espacio reportados en cada ciudad con el fin de evaluar la relación CO/NO <sub>x</sub> entre las emisiones y mediciones en aire ambiente para horas de alto tráfico.	Fuentes móviles en ruta.

Zona objeto de estudio	Características generales del inventario de emisiones	Fuentes de emisión
<i>Colombia</i>		
Valle de Aburrá – Medellín (Toro et al., 2001)	Se propone un inventario de emisiones en el Valle de Aburrá considerando los contaminantes: SO <sub>2</sub> , TSP, NO <sub>x</sub> , CO y VOC; cubriendo un área de 1600 km <sup>2</sup> con una resolución de 1km x 1km. Para estimación de emisiones industriales y biogénicas se utilizaron factores de emisión reportados por EPA, mientras que las emisiones por fuentes móviles fueron calculadas según factores de emisión de CORINAIR.	Fuentes móviles en ruta. Fuentes estacionarias puntuales. Fuentes biogénicas.
Bogotá (Giraldo et al., 2005)	Se realiza el inventario de emisiones de fuentes móviles de la ciudad de Bogotá utilizando el modelo internacional de emisiones IVE. Se estiman las emisiones totales para contaminantes criterio, VOC y algunos aldehídos. El modelo IVE permite una resolución temporal horaria. No se reporta desagregación espacial.	Fuentes móviles en ruta.
Bogotá (Zárate et al., 2007)	Se realiza la estimación del inventario para contaminantes criterio (CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , PM <sub>10</sub> ), NMVOC y los GHG CO <sub>2</sub> y CH <sub>4</sub> . Se evalúan dos metodologías para obtener el inventario de emisión para Bogotá (año base 2002). En la primera aproximación, se aplica metodología bottom-up y el modelo AIREMIS (basado en metodología CORINAIR). En la segunda aproximación, se aplica metodología top-down y factores de emisión calculados para la ciudad de acuerdo a mediciones in-situ y modelización inversa. El inventario es desagregado en tiempo (1 h) y espacio (4 km) con fines de modelización de calidad del aire.	Fuentes móviles en ruta y fuera de ruta (tráfico aéreo). Fuentes estacionarias y biogénicas.
Bogotá (Rodríguez y Beherentz, 2009)	Se realiza una actualización del inventario de emisiones provenientes de fuentes vehiculares. Se utilizan factores de emisión calculados a partir de mediciones directas en los vehículos. El trabajo se basa en la metodología IVE.	Fuentes móviles en ruta.
Bogotá (Beherentz et al., 2009)	Se realiza el inventario de emisiones por fuentes estacionarias puntuales y fuentes móviles en ruta de la ciudad de Bogotá (año base 2009). Se reportan emisiones totales anuales sin desagregación espaciotemporal. El estudio se enfoca en emisiones de contaminantes criterio (CO, NO <sub>x</sub> , PM <sub>2.5</sub> ), THC y CO <sub>2</sub> para fuentes móviles. Para fuentes estacionarias puntuales se estiman flujos de SO <sub>x</sub> , NO <sub>x</sub> y PM.	Fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales.
Bogotá (Peñalosa, 2010)	Se consolida el inventario de emisiones provenientes de las fuentes móviles en ruta y estacionarias puntuales, con el fin de realizar la distribución espacial y temporal. Para esta distribución se genera una malla de 55 x 55 km, con resolución de celdas de 1km x 1km. El inventario se enfoca en estimaciones para contaminantes criterio (CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , PM) y VOC. Se aplicó el modelo EMISENS para realizar la distribución espacial (1km x 1km) y temporal (1 h) de las emisiones vehiculares, y se utilizó ArcGis para distribución de emisiones por fuentes fijas.	Fuentes móviles en ruta. Fuentes estacionarias puntuales.
Santiago de Cali	Se realiza el inventario de emisiones para el municipio de Santiago de Cali (año base 2011), reportando emisiones totales anuales para los contaminantes criterio (CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , TSP,	Fuentes móviles en ruta.

Zona objeto de estudio	Características generales del inventario de emisiones	Fuentes de emisión
(DAGMA, 2012)	PM <sub>10</sub> , PM <sub>2.5</sub> , VOC y GHG (reportados como CO <sub>2</sub> equivalente). No se realiza desagregación espaciotemporal.	Fuentes estacionarias puntuales y de área. Fuentes biogénicas.
Envigado (Londoño et al., 2011)	Se aplica la metodología IVE para el cálculo de las emisiones de CO, NO <sub>x</sub> , SO <sub>2</sub> , PM <sub>10</sub> y VOC, producto de actividad vehicular. El inventario (año base 2010) es desagregado en tiempo (1h) y espacio (0.25km x 0.25km).	Fuentes móviles en ruta.
Valle de Aburrá – Medellín (Toro et al., 2010; 2013; 2015; 2017)	El reporte del año 2010 comprende el inventario de emisiones para contaminantes criterio (CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , PM <sub>10</sub> , PM <sub>2.5</sub> ) y VOC. El inventario incluye una actualización asociada a emisiones atribuidas al desgaste de frenos y neumáticos de vehículos automotores, emisiones por fuentes estacionarias de área para VOC. Se utilizan los modelos de emisiones desarrollados por el equipo de trabajo (MODEMED y ETROME). El inventario se desagrega en tiempo (1 h) y espacio (1km x 1km), para las emisiones estimadas al año base 2009. En 2013 se reporta una actualización para emisiones por fuentes móviles en ruta y estacionarias fijas (año base 2011), para los contaminantes criterio, VOC y se incluyen los GHG (CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> y N <sub>2</sub> O). Se conserva el mismo dominio definido en el estudio previo. Este inventario es actualizado nuevamente en los reportes del año 2015 y 2017 para las fuentes mencionadas, incluyendo nuevamente fuentes estacionarias de área (estaciones de servicio y relleno sanitario). El año base del último reporte es 2016.	Fuentes móviles en ruta. Fuentes estacionarias puntuales y de área. Fuentes biogénicas.
Cundinamarca – Jurisdicción CAR (Rojas, 2015)	Se realiza la estimación del inventario de emisiones para contaminantes criterio (CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , PM <sub>10</sub> ) y VOC aplicando la metodología y modelo de emisiones IVE. Se reportan emisiones totales anuales tomando como año base 2012. No se reporta desagregación espaciotemporal.	Fuentes móviles en ruta.
Cundinamarca (Dávila, 2015)	Las emisiones de CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , PM <sub>10</sub> y VOC por fuentes móviles y estacionarias puntuales para un día laboral (año base 2012), son desagregadas en espacio (2km x 2km) y tiempo (1 h) empleando el modelo IED (International Environmental Database).	Fuentes móviles en ruta. Fuentes estacionarias puntuales
Bogotá (SDA, 2017)	Este informe técnico de la Secretaría Distrital de Ambiente (SDA) de Bogotá, resume los resultados de los inventarios estimados para la ciudad con años base 2012 y 2014. Se reportan los flujos de emisión totales de contaminantes criterio como CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , PM <sub>10</sub> y PM <sub>2.5</sub> , además de otros contaminantes como VOC y GHG como el CO <sub>2</sub>	Fuentes móviles en ruta. Fuentes de PM susceptible a resuspensión. Fuentes estacionarias puntuales y de área (establecimientos comerciales y estaciones de servicio y almacenamiento de combustible)

### 2.3. EMISIONES POR FUENTES MÓVILES EN RUTA Y EL USO DE MODELOS DE EMISIÓN PARA SU ESTIMACIÓN

Diversos estudios han sugerido que las emisiones derivadas de actividad vehicular, especialmente las fuentes móviles en ruta, son las principales generadoras de contaminantes atmosféricos en centros urbanos, en especial en países en vías de desarrollo donde el crecimiento del parque automotor se ha incrementado durante los últimos años, haciendo necesario que estas naciones calculen los impactos en transporte y medioambiente de las fuentes vehiculares (Giraldo et al., 2005; Davis et al., 2005; D'Angiola et al., 2010; Gallardo et al. 2012; Rojas, 2015).

Según Lents et al. (n.d.), las emisiones de contaminantes por fuentes móviles en ruta pueden clasificarse en los siguientes grupos:

- Emisiones asociadas al sistema de escape de los gases de combustión. En esta categoría se diferencian dos tipos, emisiones en caliente y emisiones por partidas. Las primeras relacionadas a condiciones de operación estable del motor, mientras que las emisiones por partidas son generadas en operaciones de arranque del motor (previamente apagado y frío).
- Emisiones evaporativas, producto de combustible volatilizado en el tanque de combustible, el motor y el sistema de inyección. Se caracterizan por la liberación de compuestos orgánicos volátiles (VOC por sus siglas en inglés) y están asociadas al uso de combustible tipo gasolina o etanol.
- Emisiones de material particulado por desgaste de frenos y desgaste de neumáticos.

Las emisiones asociadas al sistema de escape se pueden considerar como la principal forma de emisión de contaminantes. Éstos son generados en el motor de combustión interna que potencia el vehículo, alimentado con combustibles como gasolina, diésel, gas natural, propano o etanol. La mezcla de combustible y aire que ingresa al motor se somete a un proceso de combustión, la expansión de los gases en este proceso impulsa el motor y los gases generados producto de la reacción de combustión son liberados por el sistema de escape del vehículo. La combustión genera principalmente compuestos como dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ) y nitrógeno ( $\text{N}_2$ ) (Lents et al., n.d.).

La composición de los combustibles fósiles, que además de su contenido de carbono e hidrógeno, pueden tener azufre, nitrógeno y otros compuestos oxidables, hace que durante la combustión incompleta se liberen en menor cantidad compuestos contaminantes como monóxido de carbono (CO), material particulado (PM), hidrocarburos (HC), óxidos de azufre ( $\text{SO}_x$ ), óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ), además de otros GHG como  $\text{CH}_4$  y  $\text{N}_2\text{O}$  (Rojas, 2015). La cantidad emitida de estos contaminantes dependerá de factores como la relación aire/combustible, la tecnología del vehículo en el sistema de combustión, el sistema de control de emisiones utilizado y el tipo de combustible.

Por ejemplo, una cantidad de aire inferior al valor estequiométrico en la relación aire/combustible, genera mayores cantidades de CO y PM en la forma de partículas de carbono conocido como “soot” (carbono orgánico y elemental principalmente) (de Nevers, 2000; Seinfeld y Pandis, 2006). El contenido de azufre en los combustibles está asociado con el aumento en las emisiones de  $\text{SO}_x$  ( $\text{SO}_2$  principalmente) y tiene influencia además en las emisiones de PM (Merkisz et al. 2002). La emisión de  $\text{NO}_x$  está relacionada con el contenido de nitrógeno en el aire (~78%) y los combustibles fósiles, generando principalmente óxido de nitrógeno (NO), dióxido de nitrógeno ( $\text{NO}_2$ ) y óxido nitroso ( $\text{N}_2\text{O}$ ) (Lents et al., n.d.). Las emisiones de  $\text{NO}_x$  se ven favorecidas por altas temperaturas de combustión en procesos con alto contenido de oxígeno.

De otra parte, ciertos contaminantes son predominantes según el tipo de combustible. La gasolina por ejemplo, emite predominantemente CO y en menor medida NO<sub>x</sub>, HC y PM; mientras que el diésel se caracteriza por mayores emisiones de NO<sub>x</sub> y PM (Rojas, 2015). En el caso de las emisiones de NO<sub>x</sub>, cuyas especies principales son el NO y el NO<sub>2</sub>, los vehículos a gasolina se caracterizan por la emisión principalmente de NO. En los vehículos diésel, la emisión de NO<sub>2</sub> es mayor con concentraciones hasta de un 30% en peso (Gallardo et al. 2012).

### **2.3.1. MODELOS DE EMISIÓN EN LA ESTIMACIÓN DE EMISIONES POR FUENTES MÓVILES EN RUTA**

Factores como las diferencias tecnológicas, el gran número de vehículos que conforman una flota vehicular y las diferencias en los patrones de conducción de cada categoría, hacen que la estimación de emisiones por fuentes móviles en ruta sea un procedimiento complejo (Lents et al., n.d.). Por lo tanto, grandes esfuerzos se han enfocado al desarrollo de metodologías para medir los FE vehicular y el desarrollo de modelos de emisiones. Éstos permiten tanto el ajuste de FE base a condiciones locales, mediante la aplicación de factores de corrección, así como la estimación de los contaminantes atmosféricos por diferentes procesos asociados al vehículo.

Diferentes modelos de emisión han sido desarrollados en el mundo para la estimación de emisiones por fuentes móviles. Características generales de algunos modelos de emisión de importancia a nivel mundial y que son ampliamente utilizados, se resumen la Tabla 2.3.

#### ***El modelo de emisiones IVE (International Vehicle Emissions Model)***

Con el fin de generar una metodología con aplicación en países en vías de desarrollo para la estimación de sus emisiones vehiculares, el Centro para la Investigación y Tecnología Ambiental (CE-CERT) de la Universidad de California en Riverside (UCR), la empresa Investigación de Sistemas Sustentables Globales (GSSR) y el Centro Internacional de Investigación de Sistemas Sustentables (ISSRC), desarrollaron la metodología y modelo de emisiones IVE (International Vehicle Emissions) (Davis et al., 2005; ISSRC, 2008).

El propósito fundamental fue generar una herramienta flexible en su uso, adaptable a cualquier país, que demande pocos insumos y que permita utilizar mediciones en campo. Esto, teniendo en cuenta que la adquisición de la información e insumos necesarios para aplicar un modelo de emisión vehicular es una tarea que demanda tiempo y recursos (humanos, económicos), dificultando su implementación en ciudades de países en vías de desarrollo (Henríquez, 2007).

IVE es un modelo basado en lenguaje Java, capaz de estimar emisiones vehiculares para una determinada área con desagregación temporal de 1 h. La metodología IVE permite reunir cuatro tipos de información que son utilizados posteriormente en el modelo (Henríquez, 2007):

- Patrones de conducción.
- Composición dinámica de la flota vehicular.
- Distribución de las tecnologías vehiculares.
- Distribución de las partidas en frío del motor.

Tabla 2.3. Características generales de principales modelos empleados en la estimación de emisiones por fuentes móviles en ruta (Tolvett, 2009; Rojas, 2015).

Modelo	COPERT (Computer Programme to Calculate Emissions from Road Transport)	MOBILE6 (Highway Vehicle Emission Factor Model)	MOVES (Motor Vehicle Emission Simulator)	IVE (International Vehicle Emissions Model)
<b>Característica</b>				
<b>País o región de origen.</b>	Unión Europea.	Estados Unidos	Estados Unidos	Estados Unidos
<b>Entidades que lo desarrollaron</b>	Financiado por la Agencia Europea del Medioambiente.	Desarrollado por la USEPA	Desarrollado por la USEPA	Desarrollado por el CE-CERT de la Universidad de California-Riverside, y los grupos GSSR y el ISSRC**; con financiación de la USEPA.
<b>Tipos de emisión que puede estimar</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Fuentes móviles en ruta: Asociadas al sistema de escape (en caliente y partidas en frío), emisiones evaporativas y por desgaste de frenos y neumáticos.</li> <li>- Fuentes móviles fuera de ruta.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Fuentes móviles en ruta: Asociadas al sistema de escape y emisiones evaporativas.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Fuentes móviles en ruta: Asociadas al sistema de escape (en caliente y partidas en frío), emisiones evaporativas y por desgaste de frenos y neumáticos.</li> <li>- Fuentes móviles fuera de ruta.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Fuentes móviles en ruta: Asociadas al sistema de escape (en caliente y partidas en frío), emisiones evaporativas</li> </ul>
<b>Contaminantes</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Criterio: CO, NOx, PM (PM<sub>10</sub> y PM<sub>2.5</sub>), SO<sub>2</sub>.</li> <li>- VOC.</li> <li>- GHG: CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O</li> <li>- Metales: Pb, Cd, Cr, Cu, Ni, Se, Zn.</li> <li>- Otros: POPs, HAPs, NH<sub>3</sub>.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Criterio: CO, NOx, PM, SO<sub>2</sub>.</li> <li>- HC.</li> <li>- GHG: CO<sub>2</sub>.</li> <li>- Metales: Pb.</li> <li>- Otros: NH<sub>3</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, Metil-Terbutil éter, 1,3-butadieno, formaldehído, acetaldehído, acroleína.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Criterio: CO, NOx, PM, SO<sub>2</sub>.</li> <li>- HC.</li> <li>- GHG: CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O</li> <li>- Otros: NH<sub>3</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, naftaleno, formaldehído.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Criterio: CO, NOx, PM (PM<sub>10</sub>), SO<sub>2</sub>.</li> <li>- VOC.</li> <li>- GHG: CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O.</li> <li>- Metales: Pb.</li> <li>- Otros: NH<sub>3</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, 1,3-butadieno, acetaldehído, formaldehído.</li> </ul>
<b>Categorías vehiculares principales</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Vehículos de pasajeros.</li> <li>- Vehículos comerciales ligeros (PBV* &lt; 3.5 ton).</li> <li>- Vehículos pesados (PBV &gt; 3.5 ton).</li> <li>- Autobuses.</li> <li>- Ciclomotores y motocicletas.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Vehículos de pasajeros.</li> <li>- Vehículos pesados (PBV &gt; 3.8 ton).</li> <li>- Motocicletas.</li> <li>- Camiones livianos.</li> <li>- Autobuses.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Vehículos de pasajeros.</li> <li>- Motocicletas.</li> <li>- Camiones.</li> <li>- Autobuses.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Vehículos de pasajeros.</li> <li>- Motocicletas.</li> <li>- Camiones.</li> <li>- Autobuses</li> </ul>
<b>Información adicional</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Utiliza FE en función de la velocidad media del vehículo con valores para más de 240 categorías vehiculares.</li> <li>- Diseñado para vehículos fabricados de acuerdo con la legislación europea y normas de control de emisiones tipo EURO.</li> <li>- Estima además el consumo de combustible</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Diseñado para estimar factores de emisión vehicular.</li> <li>- Incluye sólo vehículos fabricados bajo estándares estadounidenses.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Diseñado para reemplazar el modelo MOBILE6</li> <li>- El principal criterio de caracterización de la flota es el uso del vehículo (13 categorías disponibles).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Utiliza FE medidos y los ajusta a condiciones locales en función de la potencia específica vehicular.</li> <li>- Permite una combinación de categorías vehiculares a partir de 1372 tecnologías predefinidas.</li> </ul>

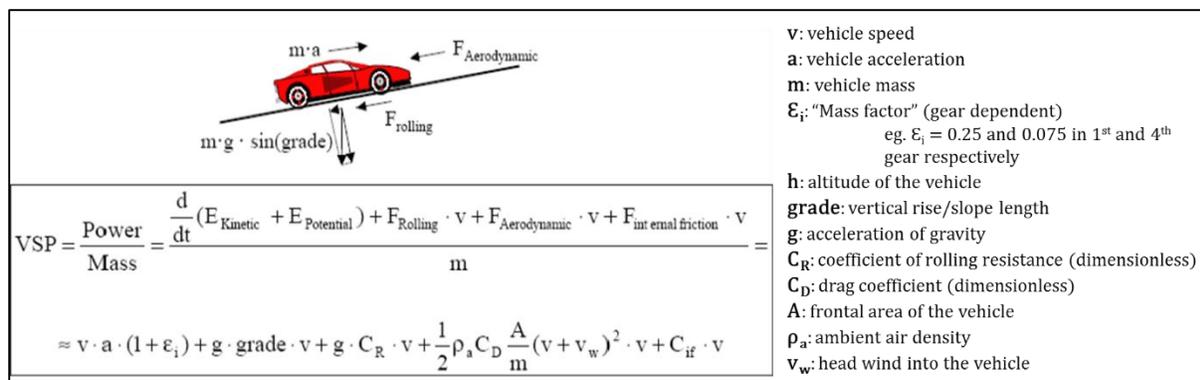
\*PBV: Peso bruto vehicular; \*\*Ver información completa de las siglas en la sección 2.3.1 y en la Tabla I.

A partir de la información reportada por Tolvett (2009) sobre los insumos generales requeridos por modelos como IVE y COPERT y MOVES, es posible realizar una tabla comparativa (Tabla 2.4) donde se observa que modelos como IVE y COPERT requieren una menor cantidad de insumos básicos, en comparación con los requeridos por modelos como MOVES. Este es un factor importante cuando se busca aplicar un modelo de emisión complejo en una zona donde la información no está disponible, o es de difícil acceso; algo común en los centros urbanos de países en vías de desarrollo como es el caso de Colombia.

Una de las diferencias principales entre los modelos IVE y COPERT, radica en que, a diferencia de COPERT cuyos FE están basados en la velocidad media del vehículo, IVE asigna un nivel de emisión según el nivel de estrés del motor y la potencia específica vehicular (VSP por sus siglas en inglés). Esto genera una representación más realista en geografías de montaña ya que el término VSP tiene en cuenta el producto de la velocidad por la aceleración equivalente, este último, función de la pendiente de la vía y la resistencia generada según el tipo de vehículo asociado al rodamiento y la aerodinámica (altura y área frontal del vehículo) (Jiménez-Palacios, 1999). Un esquema de los términos que son función del parámetro VSP se muestra en la Figura 2.2.

**Tabla 2.4. Comparación de requerimientos de algunos insumos principales en los modelos de emisión vehicular IVE, COPERT y MOVES.**

Insumo	IVE	COPERT	MOVES
Año base calendario y mes			✓
Altitud de la zona de estudio	✓		
Temperatura ambiente	✓	✓	✓
Humedad relativa	✓		✓
Consumo de combustible		✓	
Características del combustible	✓	✓	✓
Población vehicular por tipo y año modelo para el año base			✓
Distribución de la flota vehicular por tecnología o clase	✓	✓	✓
Crecimiento promedio de la flota vehicular del año base al año de análisis			✓
Kilómetros recorridos por tipo de vehículo y de vía	✓	✓	✓
Distribución de kilómetros recorridos por año modelo y hora del día			✓
Velocidad promedio por tipo de vehículo y de vía		✓	
Distribución de velocidad promedio por hora y tipo de vía			✓
Número de arranques por tipo de vehículo	✓	✓	✓
Tiempo de reposo del vehículo			✓
Distribución de la longitud promedio de los viajes		✓	
Descripción del programa de inspección y mantenimiento	✓	✓	✓
Uso de aire acondicionado	✓		



**Figura 2.2.** Esquema de cálculo del término VSP. Tomado de Jiménez-Palacios (1999) y Tolvett (2009).

La estimación de las emisiones en el modelo IVE comprende inicialmente el ajuste del FE a condiciones locales según la ecuación 2.1. El procedimiento consiste en multiplicar los FE base (B) de cada tecnología vehicular (t) por factores de corrección (K), los cuales están divididos en tres categorías principales como se muestra en la Tabla 2.5 (ISSRC, 2008).

$$Q_{[t]} = B_{[t]} * K_{(1)[t]} * K_{(2)[t]} * \dots * K_{(n)[t]} \quad (2.1)$$

**Tabla 2.5.** Tipos de factores de ajuste (K) utilizados en el modelo IVE (ISSRC, 2008; Lents et al., n.d.).

Ajustes de área local	Ajustes de calidad de combustibles, $K_{(\text{Fuel})[t]}$	Ajustes de potencia y conducción, $K_{[dt]}$
[1] Temperatura ambiente, $K_{(\text{Temp})[t]}$	[5] Calidad de la gasolina	[12] Ajustes de conducción (distribución de bins)
[2] Humedad del aire, $K_{(\text{Hmd})[t]}$	[6] Azufre en la gasolina	[13] Pendiente de la vía
[3] Altitud, $K_{(\text{Alt})[t]}$	[7] Plomo en la gasolina	[14] Uso del aire acondicionado
[4] Programa de inspección y mantenimiento, $K_{(\text{IM})[t]}$	[8] Benceno en la gasolina	[15] Ajustes de partidas (distribución de bins)
	[9] Oxigenación de la gasolina	
	[10] Calidad del diésel	
	[11] Azufre en el diésel	

Una vez se tienen los FE ajustados ( $Q_{[t]}$ ), el modelo calcula las emisiones en ruta y por procesos de encendido del motor (partidas en frío). En la Tabla 2.6 se muestran las ecuaciones empleadas en cada caso y las variables asociadas.

Tanto el modelo como la metodología IVE han sido aplicados en diferentes ciudades del mundo como Shanghái, Ciudad de México, Sao Paulo, Santiago de Chile y Buenos Aires. Para Colombia, se han obtenido resultados importantes en la ciudad de Bogotá y recientemente en zonas urbanas intermedias como es el caso de Envigado. En otras ciudades como Medellín, se emplearon FE del modelo IVE como insumo en otros modelos de emisión para la estimación de las emisiones vehiculares (Tabla 2.2).

**Tabla 2.6. Ecuaciones y variables empleadas en la estimación de las emisiones en ruta y por partidas en el modelo de emisiones IVE (Lents et al., n.d.).**

Tipo de emisión	Ecuación	Variables
Emisiones en ruta (running)	$Q_{running} = D * (\bar{U}_{LA4} / \bar{U}_{C[t]}) * \sum_t \{f_{[t]} * Q_{[t]} \sum_d (f_{[dt]} * K_{[dt]})\}$	<p><b>D</b>: distancia total recorrida*.  <b><math>\bar{U}_{LA4}</math></b>: velocidad media de la porción LA4 para el ciclo FTP = 31.8 km/h.  <b><math>\bar{U}_{C[t]}</math></b>: velocidad promedio del ciclo de conducción de la tecnología t.  <b><math>f_{[t]}</math></b>: fracción del total recorrido (D) por distancia del vehículo de tecnología t  <b><math>Q_{[t]}</math></b>: FE ajustado de la ecuación 2.1.  <b><math>f_{[dt]}</math></b>: fracción de tiempo utilizado en cada bin de conducción, d, según la tecnología t  <b><math>K_{[dt]}</math></b>: factor de ajuste de cada bin de conducción, d, para cada tecnología t</p>
Emisiones por partidas (start)	$Q_{start} = N * \sum_t \{f_{[t]} * Q_{[t]} \sum_s (f_{[st]} * K_{[st]})\}$	<p><b>N</b>: número total de partidas**.  <b><math>f_{[st]}</math></b>: fracción de partidas del vehículo en cada bin de reposo, s, según la tecnología t.  <b><math>K_{[st]}</math></b>: factor de ajuste de cada bin de reposo, s, para cada tecnología t.</p>

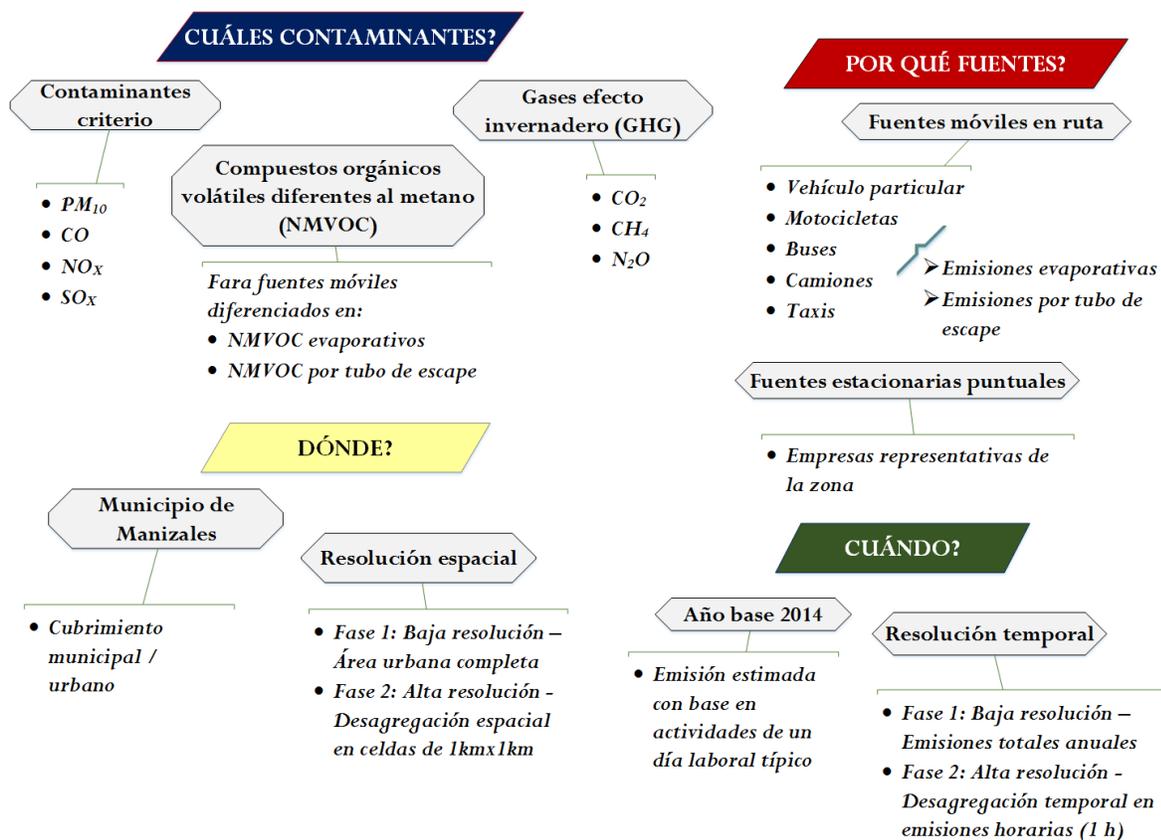
\*Si D se establece en 1km, el resultado son emisiones en g/km (tasa de emisión en ruta a condiciones locales)

\*\*Si N se establece en 1, el resultado son emisiones en g/partida (tasa de emisión por partidas a condiciones locales)

## 2.4. ASPECTOS METODOLÓGICOS GENERALES EN LA ELABORACIÓN DEL INVENTARIO DE EMISIONES POR FUENTES MÓVILES EN RUTA Y FUENTES ESTACIONARIAS PUNTUALES EN MANIZALES

Esta sección presenta de forma general la metodología llevada a cabo en la elaboración del inventario de emisiones por fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales para la ciudad de Manizales. Teniendo en cuenta que los resultados obtenidos comprendieron la elaboración de dos manuscritos en los cuales se incluye también información de la metodología llevada a cabo, esta sección pretende incluir los aspectos metodológicos centrales con información adicional relevante no incluida en los artículos. En la sección 2.5 el lector podrá consultar los manuscritos elaborados y su sección de metodología donde podrá complementar la información presentada a continuación.

Un esquema con la descripción de las dimensiones y características específicas en la realización del IE en Manizales se muestra en la Figura 2.3.



**Figura 2.3. Dimensiones y características definidas para la estimación del IE por fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales en la ciudad de Manizales.**

El inventario fue definido para cubrir principalmente el área urbana de la ciudad de Manizales (ver Figure 1 – sección 2.5.1). Teniendo en cuenta que en la zona rural del municipio de Manizales existen algunas fuentes estacionarias puntuales de importancia, se establecieron dos dominios en el inventario. Un primer dominio de menor tamaño asociado a las fuentes móviles que cubre específicamente el área urbana de Manizales, incluyendo además el área urbana del municipio de Villamaría por su cercanía con la ciudad. En un segundo dominio de mayor tamaño, que cubre el dominio de las fuentes móviles, se incluyeron las fuentes estacionarias puntuales representativas de la ciudad de Manizales, y se incluyeron además aquellas fuentes identificadas como importantes en la zona rural y que se ubican principalmente al occidente de la ciudad.

El inventario se realizó a partir de una aproximación bottom-up, estableciendo como año base 2014. El desarrollo del IE comprendió una fase inicial en la cual se estimaron las emisiones totales anuales (ton/año) de contaminantes criterio, NMVOC y GHG. En una segunda fase se llevó a cabo la desagregación espaciotemporal cuyo objetivo fue distribuir las emisiones en alta resolución tanto espacial (1km x 1km), como temporal (1 h). Lo anterior con el fin, no solo de generar un IE que pueda ser útil en la definición zonas críticas o de importancia en las emisiones de contaminantes del aire, sino que además permita su aplicación en procedimientos de simulación atmosférica, el cual es uno de los temas centrales de esta investigación.

### 2.4.1. COMPONENTE METODOLÓGICO FASE 1: ESTIMACIÓN DE EMISIONES TOTALES ANUALES, AÑO BASE 2014

#### *Estimación de emisiones por fuentes móviles en ruta*

Para llevar a cabo este objetivo se aplicó la metodología y modelo de emisiones IVE (ISSRC, 2008) en la ciudad de Manizales. Los cuatro grupos de información que son necesarios para la aplicación del modelo IVE (patrones de conducción, composición dinámica de la flota vehicular, distribución de las tecnologías vehiculares y distribución de las partidas en frío), fueron obtenidos mediante el diseño de una campaña de campo en la ciudad y el análisis de información secundaria obtenida de instituciones locales y publicaciones nacionales.

La Figura 2.4 muestra un diagrama donde se resumen los aspectos fundamentales tenidos en cuenta en la aplicación de la metodología IVE en Manizales. Detalles adicionales pueden consultarse en el Anexo A (Table A.1). La información obtenida a partir de esta metodología permite elaborar dos archivos de entrada que se requieren en el modelo de emisiones.

En un primer archivo denominado “*Location File*” se ingresó la información relacionada con los patrones de conducción, composición dinámica de la flota y distribución de partidas, además de información adicional necesaria para definir los factores de ajuste (K) en el modelo. La Tabla 2.7 muestra un resumen de la información que se ingresó en este archivo y las fuentes empleadas. Uno de los grupos de información más importantes, y que son utilizados en el ajuste a condiciones locales de los FE, es la obtención de los **patrones de conducción**. Para obtener esta información se realizaron recorridos con dispositivos GPS (Global Positioning Satellite), denominados VAM, en tres circuitos (ver Anexo A – Figure A.1) que fueron definidos teniendo en cuenta las posibles diferencias en las dinámicas de conducción en las zonas residencial, comercial e industrial de la ciudad. La información obtenida cada segundo para cada categoría vehicular, fue depurada eliminando aquellos registros donde el vehículo estuvo inactivo a causa de fallas mecánicas o episodios de congestión vial que no son parte del flujo rutinario de los vehículos (por ejemplo por choques o cierres viales repentinos). Posteriormente, las bases de datos fueron analizadas utilizando el software SpeedAnalysis que entrega la distribución de los bins de potencia, los cuales son uno de los insumos del modelo de emisiones IVE.

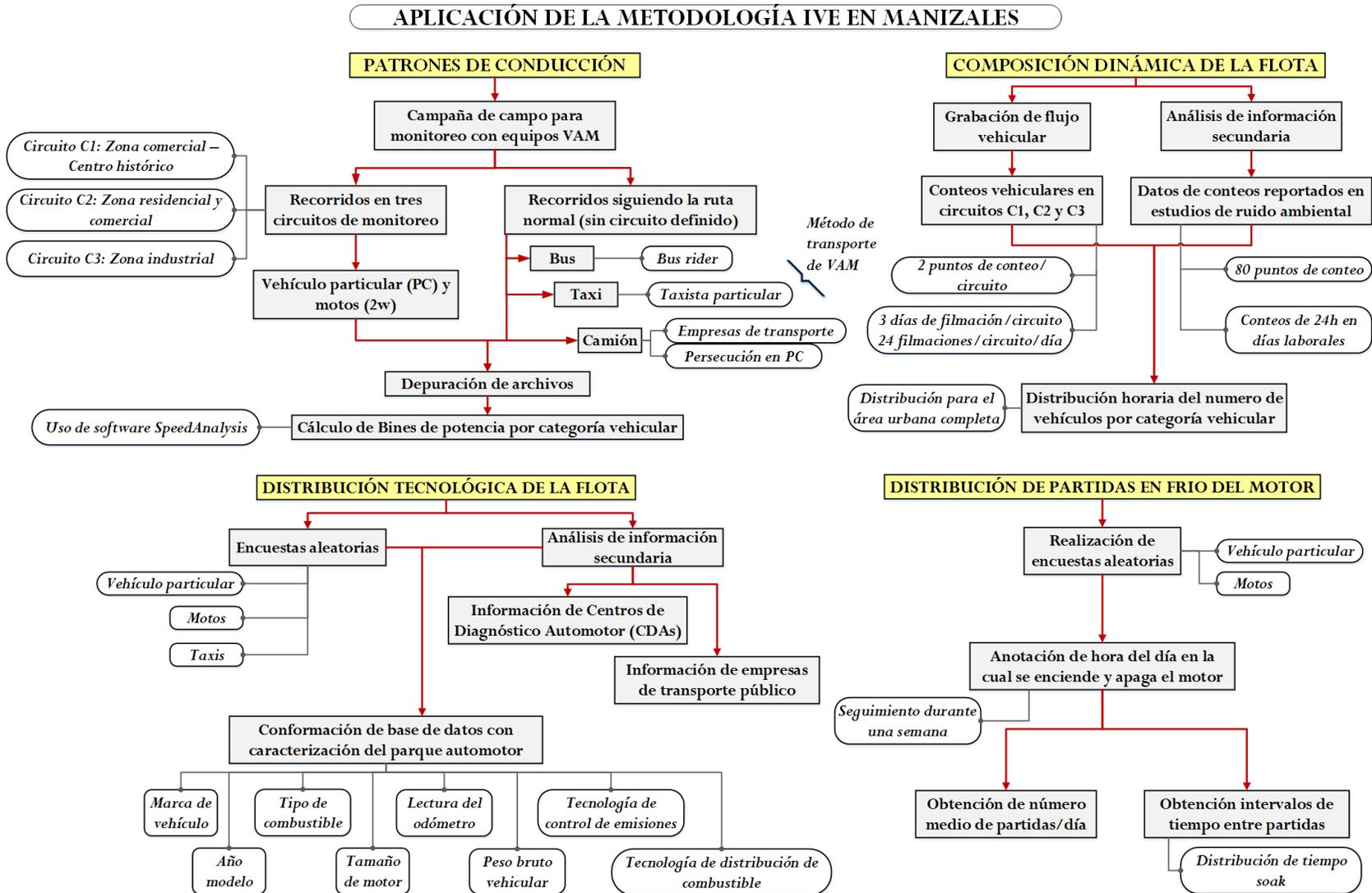


Figura 2.4. Diagrama con procedimientos generales para la aplicación de la metodología IVE en la ciudad de Manizales.

**Tabla 2.7. Información de los insumos necesarios para generar el archivo “Location File” en Manizales, utilizado en el modelo de emisiones IVE.**

Tipo de insumo	Detalles	Método de obtención o fuente de información
Información general de la zona de estudio.	- Altitud: 2150 msnm. - Temperatura ambiente: - Humedad relativa:	Información promedio horaria durante el año 2014.
Datos del parque automotor.	Cantidad total de vehículos por categoría vehicular. Parque automotor de Manizales registrado al año 2014. Ver Table 3 - sección 2.5.1.	Registros de la estación meteorológica <i>Posgrados</i> , ubicada en el centro geográfico de la ciudad.
Datos de actividad	- Kilómetros recorridos por vehículo en cada categoría vehicular (km/veh./día). Ver Table 3 – sección 2.5.1. - Cantidad de partidas por categoría vehicular (#partidas/veh./día). Ver Table 3 – sección 2.5.1.	Información suministrada por la Secretaría de Tránsito de Manizales. Análisis de bases de datos provenientes de los CDAs*. La información se complementó con encuestas realizadas durante campaña de campo. Realización de encuestas durante campaña de campo.
Patrones de conducción para cada categoría vehicular.	Distribución porcentual de 60 bins de potencia. Resultados de la distribución de los bins de potencia se muestran en el Anexo A (Figure A.2).	Recorridos en circuitos durante campaña de campo.
Patrones de partidas.	- Distribución porcentual del tiempo soak para cada hora del día. Tiempo en el que el motor ha estado apagado antes de una partida (ver Figure A.5 – Anexo A).	Realización de encuestas durante campaña de campo.
Composición dinámica de la flota vehicular	Distribución porcentual del número de vehículos para cada hora del día. La información se obtuvo para la totalidad de vehículos según los puntos de conteo analizados (ver Figure A.3 – Anexo A). Resultados de la composición dinámica horaria por categoría vehicular se muestran en el Anexo A (Figure A.4).	- Conteos en puntos definidos durante campaña de campo. - Información de los estudios de ruido ambiental en Manizales y Villamaría (CORPOCALDAS, 2014; 2015)
Características de la gasolina	- Contenido de azufre: moderado (300 ppm) - Contenido de plomo: ninguno - Contenido de benceno: bajo (0.5%) - Contenido de etanol: 10%	Información obtenida de Arango (2009); Behrentz et al. (2009); Rojas (2015) y Ecopetrol (n.d.)
Características del diésel	- Contenido de azufre: bajo (50 ppm)	
Programa de inspección y mantenimiento (I/M)	Programa de ralentí descentralizado para todos los vehículos. Su selección se realizó teniendo en cuenta que las entidades que realizan los programas de I/M en Manizales son de carácter privado.	
Porcentaje de uso de aire acondicionado a 27°C	Se definió en 0% teniendo en cuenta que la temperatura media en Manizales durante 2014 estuvo alrededor de los 17°C.	

\*CDAs: Centros de Diagnóstico Automotor

Otro archivo de entrada necesario en el modelo IVE, denominado “*Fleet File*”, contiene la **distribución tecnológica** de cada categoría vehicular. El archivo se compone de la lista porcentual de cada tecnología seleccionada entre un total de 1372 tecnologías predefinidas en el modelo. La selección de la configuración tecnológica está asociada a parámetros como la edad y peso del vehículo, el tipo de combustible, el sistema de control de emisiones, y la tecnología de distribución aire/combustible. Para la definición de la distribución tecnológica de la flota vehicular en Manizales, se conformó una base de datos con 5476 registros obtenidos de información suministrada por los CDAs y las encuestas realizadas en campo. Los registros iniciales de la base de datos contenían información relacionada con la marca y línea del vehículo, año modelo, tipo de combustible, cilindraje y lectura del odómetro con el kilometraje total recorrido por el vehículo. Fue necesario

complementar esta base de datos para completar la distribución tecnológica con los parámetros específicos solicitados por el modelo IVE.

En la Tabla 2.8 se muestra la información específica que fue necesaria para definir las tecnologías de cada categoría vehicular y la fuente de dicha información. En el Anexo A (Tabla A.2), se muestran los resultados de distribución tecnológica obtenidos para las categorías vehiculares definidas en el IE de Manizales. Las categorías vehiculares seleccionadas son descritas en la sección 2.5 (Tabla 1).

**Tabla 2.8. Fuentes y tipos de información empleada en la definición de la distribución tecnológica del parque automotor de la ciudad de Manizales**

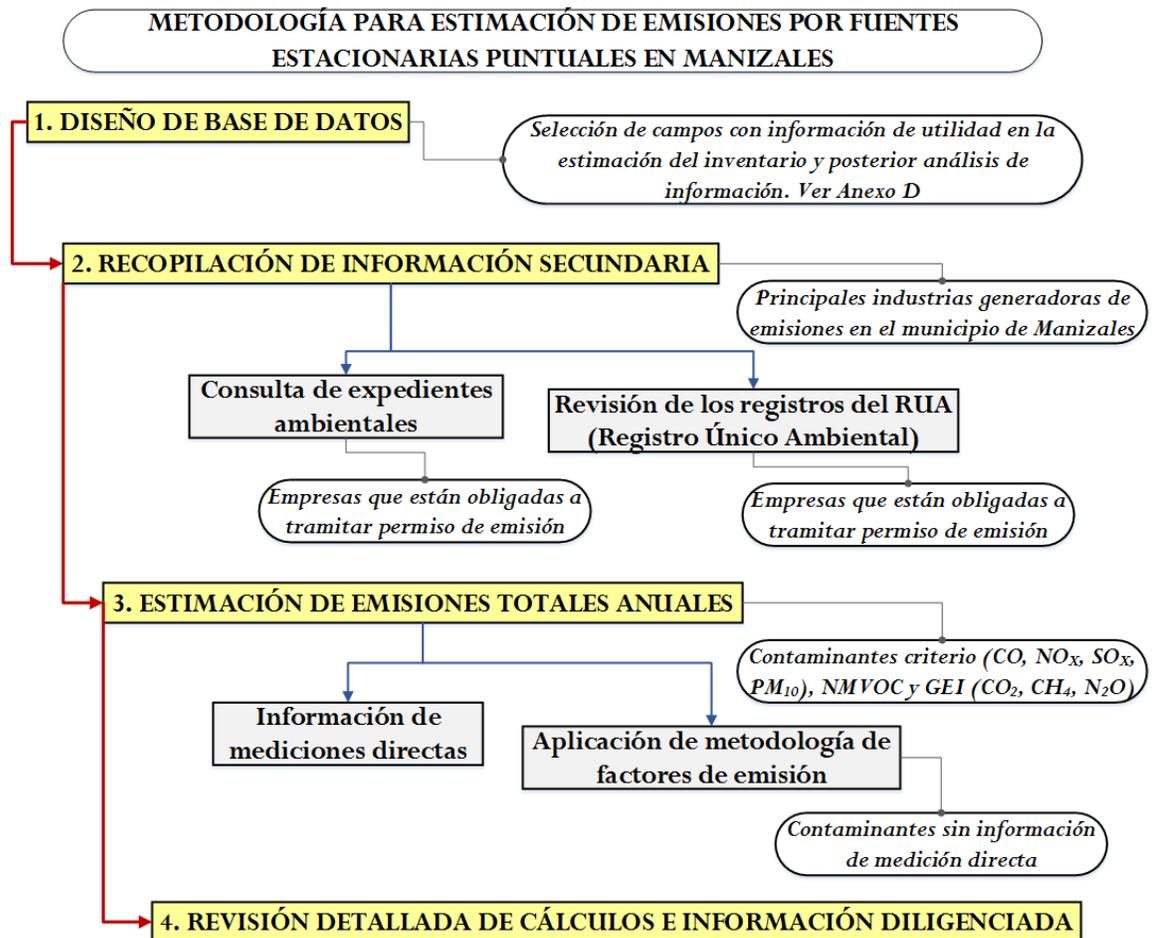
Información necesaria en IVE para definir la distribución tecnológica	Información de la flota utilizada	Fuente de la información. Estudios de soporte utilizados
Clasificación de la edad del vehículo según tres categorías: <ul style="list-style-type: none"> <li>• &lt;79000 km recorridos</li> <li>• 8000-161000 km recorridos</li> <li>• &gt;161000 km recorridos</li> </ul>	Año modelo y kilometraje total recorrido	Información suministrada por los CDAs y encuestas en campo
Clasificación según el tamaño del vehículo* <ul style="list-style-type: none"> <li>• Pequeño</li> <li>• Mediano</li> <li>• Pesado</li> </ul>	Peso bruto vehicular (GVWR por sus siglas en inglés)	Información complementada a partir de la consulta de fichas técnicas de vehículos según la marca, línea y modelo específico.
Tipo de combustible <ul style="list-style-type: none"> <li>• Gasolina</li> <li>• Diésel</li> <li>• Sistema de reconversión a gas natural</li> </ul>	Combustible utilizado	Información suministrada por los CDAs y encuestas en campo
Tecnología de control de emisiones	Año modelo, categoría vehicular y combustible utilizado	Selección basada en calendarios de introducción de tecnologías vehiculares en Colombia publicados por Toro et al. (2013) y Rojas (2015). El calendario empleado se muestra en el Anexo C (Tabla C.1).
Tecnología de distribución aire/combustible		

\*Detalles de la clasificación de las categorías vehiculares en IVE según el peso y capacidad del motor, se muestran en el Anexo B (Tabla B.1).

### ***Estimación de emisiones por fuentes estacionarias puntuales***

La estimación de emisiones por fuentes estacionarias puntuales se realizó a partir de la consulta de información secundaria de las empresas de importancia en la región. Los componentes principales de la metodología llevada a cabo en la estimación se resumen en la Figura 2.5.

Una primera etapa de desarrollo del inventario comprendió la consulta de información de medición directa de gases contaminantes y PM (los reportes más recientes tomando como límite el año 2014) que reposan en los expedientes ambientales de la Corporación Ambiental (COPOCALDAS). Se consultó además información de otras fuentes como el Registro Único Ambiental (RUA). Esta fuente de consulta fue empleada para aquellas empresas de importancia que no están obligadas a tramitar permiso de emisiones y que no cuentan con estudios de medición directa en los expedientes ambientales.



**Figura 2.5. Metodología llevada a cabo en la estimación del IE por fuentes estacionarias puntuales en Manizales.**

Previo a la recopilación de la información necesaria para la estimación de las emisiones por fuentes fijas, se realizó un diseño de una base de datos que permite no solo la estimación de las emisiones sino también llevar un registro completo de las industrias analizadas. Lo anterior es de gran utilidad para analizar aspectos como fortalezas y debilidades de la información, necesidades futuras de información, entre otros. Además, permite actualizaciones periódicas del inventario, aspecto de gran utilidad en la evaluación de las tendencias y comportamiento de las emisiones. En el Anexo D (Tabla D.1) se detallan los campos de información incluidos en la base de datos mencionada.

En la segunda etapa, se realizó la estimación de las emisiones utilizando la información de los expedientes ambientales (reportes de monitoreos isocinéticos). Según el tipo de proceso industrial, la Resolución 909 de 2008 (MAVDT, 2008) especifica los contaminantes que deben ser objeto del monitoreo por parte de las empresas para el cumplimiento de sus estándares de emisión. En este sentido, no todos los contaminantes propuestos para el inventario se reportan en los expedientes ambientales. Para los contaminantes de los cuales no se disponía información de medición directa, se utilizó la información de actividad reportada por cada empresa en sus expedientes (por ejemplo consumo de combustible y materia primas, tiempos de operación, sistemas de control, entre otros) para la aplicación de la metodología de factores de emisión. Detalles adicionales de esta metodología se describen en la sección 2.5.1, donde se incluye el manuscrito elaborado para mostrar los resultados del IE obtenido en la ciudad de Manizales para el año base 2014.

## 2.4.2. COMPONENTE METODOLÓGICO FASE 2: DESAGREGACIÓN ESPACIOTEMPORAL.

### *Fuentes móviles en ruta*

La desagregación espaciotemporal del IE por fuentes móviles en ruta se llevó a cabo mediante la aplicación de una metodología top-down reportada por Saide et al. (2009), la cual permite la distribución de las emisiones totales anuales a partir del cálculo de factores de desagregación en cada celda en el dominio. Para el cálculo de dichos factores se requiere la siguiente información:

- Longitud de arcos de vía en la red vial diferenciados según el tipo de vía.
- Clasificación de niveles de flujo vehicular obtenidos a partir de la información de conteos vehiculares en diferentes puntos de la ciudad.

La metodología detallada con los procedimientos de desagregación se describe en la sección 2.5.2, en la cual se incluye el manuscrito elaborado para mostrar los resultados de la desagregación espaciotemporal del IE por fuentes móviles en ruta para la ciudad de Manizales.

### *Fuentes estacionarias puntuales*

El procedimiento de desagregación espacial para las emisiones por fuentes estacionarias puntuales se basó en el uso de sistemas de información geográfica (GIS por sus siglas en inglés). A partir de los datos de posición geográfica, se ubicó cada industria sobre cada celda de 1km x 1km en el dominio de emisiones establecido. Para cada celda se realizó la sumatoria de los contaminantes estimados, permitiendo así obtener los flujos de emisión en cada celda y para cada contaminante en unidades de ton/año/km<sup>2</sup>.

La desagregación temporal se realizó a partir de la información reportada por cada empresa asociada a las jornadas laborales y tiempos de operación de los equipos generadores de emisiones. Debido a que no se dispone de información sobre los intervalos de tiempo específicos en los cuales se realiza la descarga de contaminantes a la atmósfera, se asumió una descarga uniforme horaria durante el tiempo de operación específico. En la Figura 2.6 se muestra un esquema de las jornadas laborales utilizadas, las cuales fueron obtenidas de la información secundaria analizada de las empresas en Manizales. Dada la complejidad descrita en la asignación del tiempo preciso de emisión, este tipo de procedimientos de desagregación temporal ha sido utilizado en ciudades como Bogotá (Baublitz et al., 2014), en el cual se realizó la desagregación temporal de las emisiones industriales con fines de modelización numérica. Asimismo, en esta ciudad se han aplicado metodologías de distribución temporal asignando intervalos de tiempo aleatorios (Peñalosa, 2010).

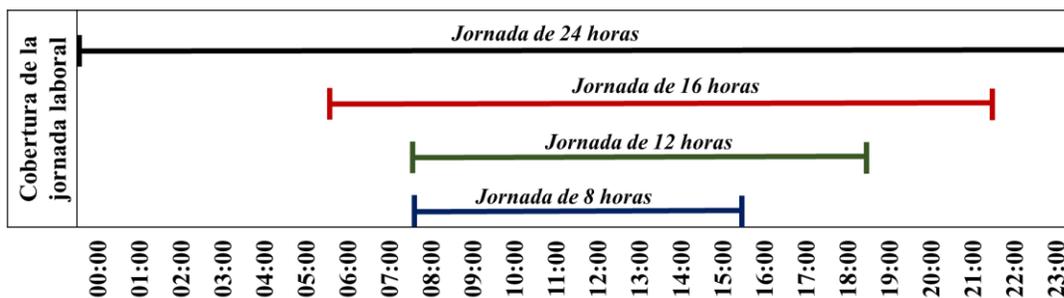


Figura 2.6. Cobertura horaria de las jornadas laborales para la desagregación temporal de las emisiones por fuentes estacionarias puntuales en Manizales.

## 2.5. RESULTADOS

### 2.5.1. INVENTARIO DE EMISIONES TOTALES, AÑO BASE 2014

Los resultados obtenidos en la elaboración del inventario de emisiones totales por fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales se consolidaron en el siguiente artículo que fue publicado en la revista internacional *Atmospheric Environment*. El material suplementario puede consultarse en el Anexo A.

#### **RELATIVE IMPACT OF ON-ROAD VEHICULAR AND POINT-SOURCE INDUSTRIAL EMISSIONS OF AIR POLLUTANTS IN A MEDIUM-SIZED ANDEAN CITY**

**C.M. González<sup>a</sup>, C.D. Gómez<sup>a</sup>, N.Y. Rojas<sup>b</sup>, H. Acevedo<sup>c</sup>, B.H. Aristizábal<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Hydraulic Engineering and Environmental Research Group, Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, Carrera 27 64-60. Manizales, Colombia

<sup>b</sup>Air Quality Research Group. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá. Carrera 30 45-03. Bogotá, Colombia

<sup>c</sup>Alternative Fuels, Energy and Environmental Protection Research Group. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá. Carrera 30 45-03. Bogotá, Colombia

*Atmospheric Environment* 152 (2017) 279-289

#### **Abstract**

Cities in emerging countries are facing a fast growth and urbanization; however, the study of air pollutant emissions and its dynamics is scarce, making their populations vulnerable to potential effects of air pollution. This situation is critical in medium-sized urban areas built along the tropical Andean mountains. This work assesses the contribution of on-road vehicular and point-source industrial activities in the medium-sized Andean city of Manizales, Colombia. Annual fluxes of criteria pollutants, NMVOC, and greenhouse gases were estimated. Emissions were dominated by vehicular activity, with more than 90% of total estimated releases for the majority of air pollutants. On-road vehicular emissions for CO (43.4 Gg/yr) and NMVOC (9.6 Gg/yr) were mainly associated with the use of motorcycles (50% and 81% of total CO and NMVOC emissions respectively). Public transit buses were the main source of PM<sub>10</sub> (47%) and NO<sub>x</sub> (48%). The per-capita emission index was significantly higher in Manizales than in other medium-sized cities, especially for NMVOC, CO, NO<sub>x</sub> and CO<sub>2</sub>. The unique mountainous terrain of Andean cities suggest that a methodology based on VSP model could give more realistic emission estimates, with additional model components that include slope and acceleration. Food and beverage facilities were the main contributors of point-source industrial emissions for PM<sub>10</sub> (63%), SO<sub>x</sub> (55%) and NO<sub>x</sub> (45%), whereas scrap metal recycling had high emissions of CO (73%) and NMVOC (47%). Results provide the baseline for ongoing research in atmospheric modeling and urban air quality, in order to improve the understanding of air pollutant fluxes, transport and transformation in the atmosphere. In addition, this emission inventory could be used as a tool to identify areas of public health exposure and provide information for future decision makers.

## 1. Introduction

During the last decades, air pollutants derived from urban emissions have become a big concern to human health, environmental sustainability and global climate (Seinfeld and Pandis, 2006; Londoño et al., 2011). The problem of regional and global atmospheric pollution is especially severe in cities of developing countries, where there is a continuous fast increase in population, urbanization, traffic, industrialization, consumption and energy use (Tuia et al., 2007; Zárate et al., 2007; D'Angiola et al., 2010).

The definition of strategies and policies to mitigate the adverse effects of exposure to air pollutants requires a complete knowledge of pollutant dynamics in urban environments. One of the most important steps for this purpose is quantifying pollutant fluxes and studying its transport and transformation at local and regional scales. The estimation of an Emission Inventory (EI) is crucial to identify significant sources of air pollutants and establish prioritized regulatory actions (US EPA, n.d.). An EI is a database that lists the amount of air pollutants emitted from different sources to the atmosphere of a given territory (at local, regional or global scale), during a certain period (past, present or future) (Parra et al., 2006). Different applications have been developed to compile and calculate EIs, not only as a policy tool but also as a scientific one. EIs are commonly used as input information for atmospheric dispersion and chemical transport models, with the aim of understanding physical and chemical processes in the atmosphere and the influence of air pollutants on these processes (Pulles and Heslinga, n.d.).

Knowledge of air pollutant emissions in South America is scarce and uncertain. The majority of studies have been focused in megacities such as Santiago in Chile (Henríquez, 2007; Saide et al., 2009, 2011; MMA, 2012), Bogotá in Colombia (Giraldo, 2005; Behrentz et al., 2009; Peñaloza, 2010), and the metropolitan areas of Buenos Aires in Argentina (Henríquez, 2007; D'Angiola et al., 2010), Lima in Perú (Arellano, 2013; Dawidowski et al., 2014), and Sao Paulo in Brazil (Vivanco and Andrade, 2016; CETESB, 2014). This information was the baseline for additional analysis such as the evaluation of emission estimates (Gallardo et al., 2012), and for performing regional EIs with application in numerical modeling (Alonso et al., 2010). However, these authors agree on the necessity for more comprehensive and up-to-date studies on this field, highlighting the current lack of knowledge about pollutant emissions in the continent. This issue is also representative in medium-sized cities, where the study of air pollutant emission and its dynamics is minimum in spite of its rapid growth and urbanization, making these zones vulnerable to potential effects of air pollution.

In Colombia, urban air pollution is one of the most costly problems associated with environmental degradation, mainly due to increased mortality and morbidity (World Bank, 2006). Health costs related to urban air pollution have increased from 0.8% in 2002 to 1.12% in 2010 of Gross Domestic Product, GDP, (Golub et al., 2014). Different strategies and policies have been proposed by Colombian government for reducing adverse effects of air pollution, in order to formulate effective Air Quality Management Plans (AQMP), in which the estimation of pollutant emissions is essential.

Nevertheless, the recent efforts for determining pollutant fluxes derived from anthropogenic and natural processes, and their impacts on air quality, have been focused in large urban areas with a population higher than 2 million inhabitants such as Bogotá and Medellín. These cities have recently published updates of their EIs associated mainly with anthropogenic activities (Peñaloza, 2010; Toro et al., 2013). Other urban areas, especially those built along the tropical Andean mountains with a population less than one million inhabitants, have limited knowledge about its real situation in terms of air pollution and the possible risk and adverse effects associated with it. These high-mountain regions are particularly important due to its high climate variability and steep topography (Huggel et al., 2015).

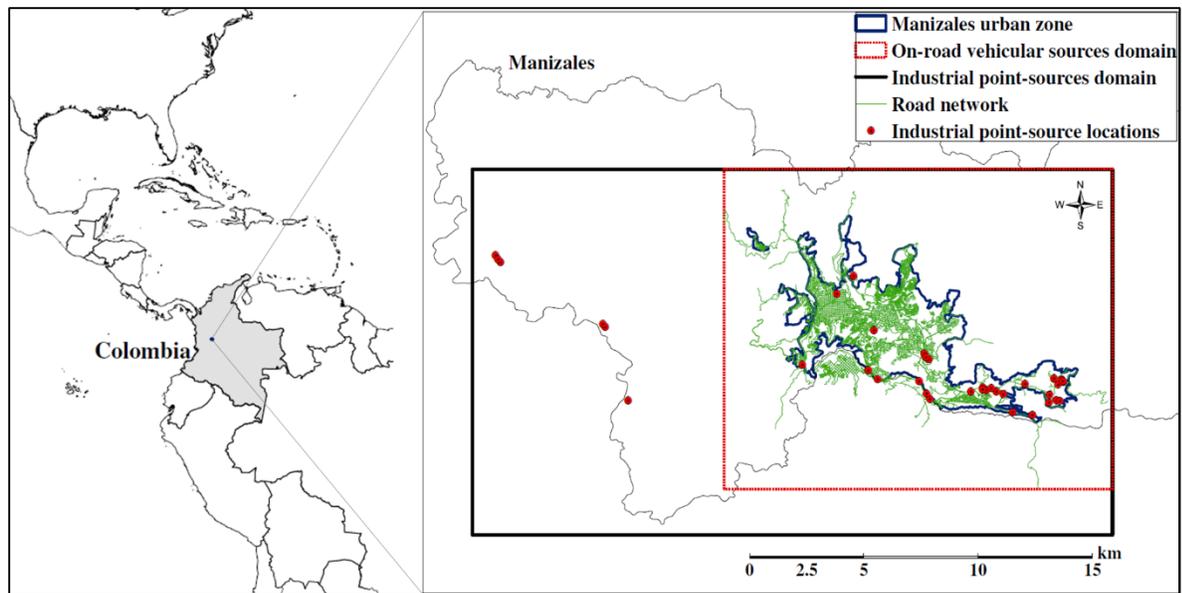
In the medium-sized Andean city of Manizales, Colombia (urban population: 368000), recent publications recognized the need for more comprehensive studies about pollutant dynamics, especially aerosols and sulfur compounds (Aristizábal et al., 2011; González and Aristizábal, 2012). The city is located in a unique mountain-ridge topography, on the western slopes of the central Cordillera of the Andes at 2150 m above sea level. The urban zone is characterized by a limited area for growth and a relatively high urban density (~6800 inhabitants/km<sup>2</sup>). Daily emissions from vehicles affect Manizales air quality in a city with a high traffic density – 310 vehicles per 1000 inhabitants in 2013, value higher than that registered in the megacity Bogotá, with 294 vehicles per 1000 inhabitants (Manizales Cómo Vamos, 2013). The city is also impacted by emissions from an industrial zone, with facilities in diverse sectors such as coal-fired metal foundry recycling, food and beverage processing, plastic processing, metallurgy and a municipal solid waste incinerator (MSWI). Finally, the active Nevado del Ruiz volcano located 28 km to the southwest, whose daily gas and particle releases influence the atmospheric chemistry of the city and neighboring towns. These factors are combined with the presence of precipitation microclimates and low local wind velocities - not exceeding 4 m/s, as well as orographic effects over air masses motion at a regional scale.

Currently, there is no baseline of information in the city about air pollutant emissions, its dynamics and main sources. In that sense, this article focuses on assessing the contribution of main anthropogenic activities associated with vehicular (on-road) and industrial processes (point-source releases) in Manizales, in terms of annual emission fluxes of criteria pollutants: carbon monoxide (CO), nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>), sulfur oxides (SO<sub>x</sub>), particulate matter with diameter less than 10 μm (PM<sub>10</sub>). Other compounds such as non-methane volatile organic compounds (NMVOC), and the greenhouse gases: carbon dioxide (CO<sub>2</sub>), methane (CH<sub>4</sub>) and nitrous oxide (N<sub>2</sub>O). The estimated emissions in Manizales were compared with those reported in medium-sized and megacities in South America and other cities around the world. A per-capita emission index was calculated to analyze the local problem in a global context. Results shown in this work are the baseline of ongoing research in the city, whose main objective is the estimation of anthropogenic and natural air pollutant fluxes, disaggregated in time and space, as a tool to study their impacts using atmospheric modeling tools. This information could improve the air quality understanding and its management in medium-sized Andean cities, in order to protect human health and the environment.

## **2. Materials and methods**

### ***2.1. Study area and pollutants involved in the EI***

Total annual fluxes (ton/yr) of criteria pollutants (CO, NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, PM<sub>10</sub>), NMVOC, and greenhouse gases (CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O) from vehicular (on-road) and industrial (point-sources), were estimated in the city of Manizales, Colombia, following a bottom-up approach and 2014 as the year base. The EI domain was designed to cover mainly the urban area of the city (where there is a significant influence of vehicular sources and the presence of main industrial facilities). Few significant industrial point sources, located outside from the urban area were included in the study. Two merged domains were defined, one for vehicular sources (only urban area) and the outermost domain covering urban and rural zones for industrial point sources (Fig. 1).



**Figure 1. Emission inventory domain for on-road vehicular and industrial point-sources in Manizales, Colombia.**

## 2.2. On-road vehicular emission approaches

Vehicular emissions were calculated using the International Vehicle Emissions (IVE) model (Davis et al., 2005; ISSRC, 2008a). The Java-based language model was designed to estimate vehicle emissions for a specific area, especially for emerging countries - due to the existing difficulties of information availability (Henríquez, 2007). Emissions are estimated considering the vehicle specific power (VSP) and engine stress while other models are based on the average speed only. This refinement incorporates mountain geographies (slope), acceleration, aerodynamic and rolling resistance (Jimenez-Palacios, 1999). The VSP is defined as the instantaneous power per unit mass of the vehicle. This variable is derived from the instantaneous velocity and acceleration, and is related with the engine power demand having a significant influence in vehicular emissions (ISSRC, 2008c; Wang et al., 2008). On the other hand, the engine stress is a parameter used in addition to VSP for improving the emission estimation for pollutants such as CO, NMVOC and NO<sub>x</sub>. This parameter is established for two possible situations (low and high engine stress), and is function of the VSP and the engine revolution per minute (RPM) index defined in IVE methodology (ISSRC, 2008c). Low engine stress is obtained when RPM is low and there are low speed and acceleration over the last 20 s of vehicle operation. High engine stress occurs in the contrary case - high RPM, speed and acceleration (ISSRC, 2008c).

The IVE model estimates separately running, start-up and evaporative emissions (for NMVOC). Four types of data sets are necessary in the model: dynamic vehicle fleet composition, vehicle technology distribution, driving and engine start/stop patterns. A local base emission rate can be estimated using a series of correction factors from the specific fleet technology distribution, VSP and engine stress distribution, fuel type and composition, inspection and maintenance (I/M) scheme, and local values of relative humidity and temperature. This information can be obtained from secondary sources and field campaigns following the IVE methodology. Details about field data collection activities and procedures can be found in the IVE Model Users Manual ISSRC (2008b). Additionally, different studies have been published using IVE methodology in the analysis of vehicular activity (Lents et al., 2004a, 2004b; Chen et al., 2005) and the estimation of on-road vehicular emissions, not only in other cities around the world (e.g. Guo et al., 2007; Liu et al.,

2007; Wang et al., 2008; Goyal et al., 2013; Mishra and Goyal, 2014), but also in Colombia (Londoño et al., 2011; Rojas, 2015).

In this study, the IVE methodology was implemented for Manizales. In the group of driving patterns, several field campaigns were performed during working days from November 10 to December 6, 2014. High-resolution GPS devices were employed to measure instantaneous speed, altitude, time and location (latitude, longitude) of testing vehicles every second. For passenger cars (PC) and motorcycles (2w), three monitoring driving circuits were defined in a route that included residential, commercial and industrial areas of the city (Fig. A.1 supplementary material). The bus, taxi and truck categories were tested in their usual (bus) or random (taxi, truck) routes. The driving patterns obtained during field campaigns were used to estimate the VSP and motor stress distribution of each vehicle category according to equations (1) and (2). This information was correlated to a set of emission variations or power bins used as input information to IVE model. There are 3 engine stress categories and 20 VSP categories, making a total of 60 bins. All the approaches followed in this study regarding VSP and engine stress estimations are described in ISSRC (2008a; 2008c). Additional information about sampling campaigns for vehicular activity and results of average power bin distribution obtained in Manizales can be found in Table A.1 and Fig. A.2 of supplementary material.

$$VSP = v \left[ 1.1a + 9.81 \left( \text{atan}(\sin(\text{grade})) \right) + 0.132 \right] + 0.000302v^3 \quad (1)$$

$$\text{Engine Stress} = \text{RPMIndex} + \left( 0.08 \frac{\text{ton}}{\text{kW}} \right) * \text{PreaveragePower} \quad (2)$$

In equation (1)  $v$  is velocity (m/s),  $a$  is acceleration ( $\text{m/s}^2$ ) and  $\text{grade}$  is defined as  $(h_{t=0} - h_{t=-1})/v_{(t=-1 \text{ to } 0 \text{ s})}$ ; being  $h$  the altitude (m). In equation (2)  $\text{PreaveragePower}$  is equivalent to Average ( $\text{VSP}_{t=-5 \text{ s to } -25 \text{ s}}$ ) ( $\text{kW/ton}$ ) and  $\text{RPMIndex}$  is equal to  $\text{velocity}_{t=0}/\text{SpeedDivider}$ , being the  $\text{SpeedDivider}$  ( $\text{s/m}$ ) a value defined in IVE methodology as a function of speed and power cut points. Detailed information of these equations and the subsequent bin distribution are described in ISSRC (2008a; 2008c).

The dynamic vehicle fleet composition was obtained combining two methods: 1) Traffic counts using video cameras, performed during the driving pattern field campaigns, with two vehicular counting stations at each test route. 2) Secondary traffic count data collected by the environmental agency (CORPOCALDAS) in the metropolitan area of the city during 2014 in ~80 points, during weekdays, covering 24 h of the day, originally used for an environmental noise study. Figs. A.3 and A.4 of supplementary material show the spatial distribution of traffic count points and the overall vehicle fleet distribution obtained in Manizales for each vehicle category during a typical working day.

Vehicle start patterns were obtained from 50 field surveys (one week each), in which number of starts and time interval between starts were registered. The information allowed the definition of fraction of vehicle starts and soak times (distribution of how long the engine has been resting when it started). Fig. A.5 of supplementary material shows the distribution of vehicle start patterns in Manizales.

The vehicle technology distribution was obtained from field surveys and secondary information given by the environmental agency, from datasets of vehicle inspection centers (CDAs as per their acronym in Spanish). These datasets contain information such as vehicle type, model year, fuel type, engine size, odometer reading; which were analyzed to define the vehicle technology distribution based on fuel, engine type, and emission control technology. The overall vehicle technology distribution obtained in Manizales is shown in Table A.2 of supplementary material. The mean Vehicle Kilometer Traveled (VKT) for each vehicle category was estimated. Information of odometer readings and model year were combined for PC and 2w vehicles to obtain the annual

vehicle use (an example of VKT PC distribution in Manizales is shown in Fig. A.6 of supplementary material). Daily VKT for additional categories as complemented from field surveys performed to bus drivers (five bus companies), taxi and truck vehicles (30 surveys). In addition, the Transit Authority provided total fleet composition data during 2014. This information was used to estimate the overall activity (km/d) for each vehicle category in the emission inventory (Table 3). Local adjusted on-road vehicular emission rates were obtained from the IVE model, in terms of five major vehicle categories defined in Manizales (Table 1).

**Table 1. Summary of on-road vehicular emission rates in Manizales, Colombia.**

Vehicle category	Fuel type	CO	NO <sub>x</sub>	SO <sub>x</sub>	PM <sub>10</sub>	NMVOC	NMVOC evap.	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>
		Running emission rate (g/km)								
Passenger car (PC) (GVWR < 4.1 ton)	Petrol	18.535	1.232	0.029	0.005	1.618	0.221	271.521	0.009	0.324
	Diesel	0.089	0.070	0.000	0.022	0.043	0.000	18.434	0.000	0.000
	NGrt	4.311	0.239	0.000	0.001	0.022	0.043	27.824	0.001	1.049
Motorcycle (2w)	2-Stroke	23.137	0.039	0.005	0.213	9.518	0.242	36.453	0.000	1.904
	4-Stroke	2.930	0.059	0.004	0.019	0.633	0.062	40.110	0.000	0.127
Taxi (GVWR < 4.1 ton)	Petrol	5.058	0.263	0.009	0.003	0.200	0.199	82.451	0.003	0.040
	Diesel	0.050	0.062	0.000	0.036	0.032	0.000	14.535	0.000	0.000
	NGrt	30.592	1.677	0.001	0.006	0.091	0.593	302.266	0.018	4.231
Bus (GVWR ≥ 4.1 ton)	Diesel	5.680	17.831	0.009	2.667	1.335	0.000	895.072	0.007	0.000
Truck (GVWR ≥ 4.1 ton)	Diesel	17.751	26.904	0.012	4.055	3.546	0.000	1240.802	0.008	0.000
Start-up emission rate (g/start-up)										
Passenger car (PC) (GVWR < 4.1 ton)	Petrol	21.955	0.930	0.004	0.011	1.311	0.339	21.538	0.006	0.262
	Diesel	0.232	0.010	0.000	0.033	0.061	0.000	1.842	0.000	0.000
	NGrt	2.463	0.137	0.000	0.003	0.008	0.077	3.116	0.001	0.384
Motorcycle (2w)	2-Stroke	56.086	0.435	0.001	0.412	12.355	3.440	6.789	0.000	2.471
	4-Stroke	3.737	0.352	0.000	0.037	0.723	0.115	2.683	0.000	0.145
Taxi (GVWR < 4.1 ton)	Petrol	7.619	0.270	0.001	0.005	0.520	0.286	3.158	0.001	0.104
	Diesel	0.106	0.005	0.000	0.045	0.036	0.000	0.919	0.000	0.000
	NGrt	22.426	0.905	0.000	0.013	0.074	0.872	11.055	0.009	3.463
Bus (GVWR ≥ 4.1 ton)	Diesel	0.541	1.880	0.001	3.646	0.048	0.000	61.011	0.004	0.000
Truck (GVWR ≥ 4.1 ton)	Diesel	1.261	2.803	0.001	4.243	0.089	0.000	83.502	0.005	0.000

NGrt: Natural gas retrofit (petrol vehicle modified to run on compressed natural gas)

GVWR: Gross vehicle weight rating

### 2.3. Point-source emission approaches

Point-source emissions covering large and medium-sized industrial facilities were included in this work. The facilities have to report to the local environmental authority their atmospheric emissions (from stack sampling) and some process information such as raw materials, energy consumption,

fuel type and properties, equipment, and emissions control technology. The information registered in the environmental agency database was reviewed and used for the EI, thus, no stack sampling campaigns were performed. Each facility has to report stack test results periodically, e.g. once or twice per year, depending on its emission permit. Samples are taken during at least one working day of full production and reported with a minimum of three repetitions, in order to guarantee the reliability of results. Industrial facilities have to report their emission fluxes (kg/h) of certain pollutants according to the type of fuel and production process, following the national regulations (MAVDT, 2008; 2010). The stack sampling campaigns follow the US EPA methods (EPA, 1984), which were adopted by the Colombian government as regulatory methods in the country (MAVDT, 2010). In general, these reports include mainly emissions from the combustion of fuels such as fuel oil and liquefied petroleum gas (NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub> and PM); coal (CO, NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub> and PM); and natural gas (NO<sub>x</sub> mainly). Emissions related to production process only, highlighting scrap metal recycling and waste and body incineration, reported mainly NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub> and PM fluxes. The information analyzed in this study covered 37 facilities comprising 83 industrial point sources (facilities with one or more point sources).

For pollutants with no stack sampling information (especially greenhouse gases and NMVOC), the emission factor (EF) approach was applied, following equation (3) (US EPA, 2013):

$$E_p = \sum_{j,k,l} EF_{j,k,l} * A_{k,l} * \left(1 - \frac{n_{j,k,l}}{100}\right) \quad (3)$$

Where,  $p, j, k, l$  represent pollutant type, fuel type, source category and technology type respectively;  $E$  is the annual emission of pollutant  $p$ ;  $A$  is the annual activity data (e.g. fuel consumption or product output);  $EF$  is the assumed average emission factor;  $n$  is the average removal efficiency. EFs were taken from EPA AP-42 database (US EPA, 1995). There were two main groups of EFs used in the study. The first group was obtained from EPA-AP42 (chapter 1 - External combustion sources), which summarizes EFs associated to fossil fuel combustion depending the type of fossil fuel, the type of combustion equipment and its firing configuration. These data were obtained from reports that each facility has to include in its emission permit. Additionally, the estimation of pollutants such as SO<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> required information of sulfur (S) and carbon (C) content of fuels. These data were obtained from national reports (UPME, 2012; Toro et al., 2010; Ecopetrol, n.d.). The second group of EFs was related with some industrial processes that emit pollutants without the use of fossil fuels. For example, waste and body incineration (EFs from chapter 2 - Solid waste disposal) and scrap metal recycling (chapter 12 - Metallurgical industry). Due to the lack of information of local EFs, the EPA database has been used in other Colombian cities for estimating point-source emissions (Peñaloza, 2010; Toro et al., 2013).

### 3. Results and discussion

On-road vehicular activity released more than 90% of the total combined air pollutants estimated in the mid-size tropical Andean city of Manizales. Only industrial point-source emissions of SO<sub>x</sub> (0.114 Gg/yr) were higher than that obtained from on-road vehicular sources reaching 81% of the total emission. On-road vehicular sources dominated production of the seven other pollutants by orders of magnitude, generating vastly more CO (43.4 Gg/yr), NMVOC (9.6 Gg/yr), NO<sub>x</sub> (4.9 Gg/yr), PM<sub>10</sub> (0.76 Gg/yr), CH<sub>4</sub> (2.86 Gg/yr), N<sub>2</sub>O (0.01 Gg/yr) and CO<sub>2</sub> (454 Gg/yr) (Table 2). Previous hypothesis from other studies (Aristizábal et al., 2011; González et al., 2015; Velasco, 2015), which suggest that on-road vehicular sources are the major anthropogenic source of air pollution in the medium-sized Andean city of Manizales, was supported quantitatively in this work when comparing the two most important air pollutant emission sources in the city.

**Table 2. Summary of annual (2014) on-road vehicular and industrial point-source emissions in Manizales, Colombia.**

Source type	Emission (ton/yr)							
	CO	NO <sub>x</sub>	SO <sub>x</sub>	PM <sub>10</sub>	NMVOC	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>
<b>Industrial (point-source)</b>	219.1	89.5	113.5	37.2	4.4	64077	1.2	1.8
<b>Vehicular (on-road)</b>	43395.6	4890.1	26.0	764.8	9646.3	454441	10.6	2859.8
<b>Total</b>	<b>43614.6</b>	<b>4979.6</b>	<b>139.4</b>	<b>802.0</b>	<b>9650.7</b>	<b>518517</b>	<b>11.8</b>	<b>2861.6</b>
<i>Contribution of each source to total emissions (%)</i>								
<i>Industrial (point-source)</i>	<i>0.5</i>	<i>1.8</i>	<i>81.4</i>	<i>4.6</i>	<i>0.05</i>	<i>12.4</i>	<i>9.9</i>	<i>0.1</i>
<i>Vehicular (on-road)</i>	<i>99.5</i>	<i>98.2</i>	<i>18.6</i>	<i>95.4</i>	<i>99.95</i>	<i>87.6</i>	<i>90.1</i>	<i>99.9</i>

Higher emissions of CO, NMVOC, NO<sub>x</sub> and PM<sub>10</sub> from on-road vehicular sources were obtained in Manizales when compared to those reported in the global inventory EDGAR-HTAP\_V2 for the transportation sector. This emission dataset contains information of CH<sub>4</sub>, CO, SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, NMVOC, NH<sub>3</sub>, PM<sub>10</sub>, PM<sub>2.5</sub>, elemental carbon (BC) and organic carbon (OC) for 8 sectors in 0.1 deg. x 0.1 deg. resolution for the years 2008 and 2010 (more information can be found on [http://edgar.jrc.ec.europa.eu/htap\\_v2/index.php](http://edgar.jrc.ec.europa.eu/htap_v2/index.php)). Taking into account the low resolution of the global EI, information of emissions during 2010 were obtained from a unique cell (5.0 lat; -75.6 lon.) covering the whole area of study. Values obtained were in order of 5.96 Gg/yr of CO, 0.72 Gg/yr of NMVOC, 0.53 Gg/yr of NO<sub>x</sub> and 0.015 Gg/yr of PM<sub>10</sub>. These lower results suggest that global EIs, characterized by low resolutions and usually top-down approaches (e.g. from energy balance statistics as it is performed in EDGAR), could underestimate fluxes from transport sector in medium-size or smaller cities, making difficult a possible comparison with its local and/or bottom-up EIs. In the case of point-source industrial emissions, the comparison with the global inventory was not possible. First, because reports from EDGAR-HTAP\_V2 database for industrial sector covered energy input data from all kind of industrial sources. Second, reports for industrial sector in this global EI were much higher than estimations obtained not only in Manizales, but also when compared data with local EIs in other Colombian cities such as Bogotá (Peñaloza, 2010) and Medellín (Toro et al., 2013), suggesting a general overestimation in Colombia. Hence, this global EI could not give an accurate representation of point-source industrial emissions in the medium-sized city of Manizales.

### 3.1. On-road vehicular emissions

Motorcycles (2w) produced higher amounts of CO and NMVOC (Table 3), comprising 50% and 81% of total emissions respectively (Fig. 2). This category involves 46% of total vehicular fleet. Furthermore, there is a considerable percentage of 2-stroke engines in the motorcycle fleet (54%). This technology is characterized by the non-use of an exhaust-emission control device in comparison with 4-stroke engines, which use catalyst as exhaust-emission control. As it is shown in Table 1, emission rates for petrol 2-stroke engines were 8-17 times higher than those estimated for 4-stroke engines. This difference suggests the high impact of this technology in total releases, especially for NMVOC. The use of petrol as fuel contributed to high emissions of NMVOC and CO (Fig. 3). This fuel is used in the total 2w fleet and 86% of PC. A similar pattern was described by D'Angiola et al. (2010) in the Metropolitan Region of Buenos Aires, Argentina, where petrol light-duty vehicles were the main emitters of CO and NMVOC (85% and 65% of emissions respectively). The predominant use of petrol was also associated with higher fluxes of SO<sub>x</sub> (92%) than that obtained for diesel

vehicles in Manizales (Fig. 3). This difference could be attributed to a higher overall activity of petrol vehicles (PC and 2w) in comparison with buses and trucks (Table 3), which use diesel only. In addition, the differences in fuel sulfur content with 300 ppm for petrol and 50 ppm in diesel.

**Table 3. Running and start-up emissions from on-road vehicular sources in Manizales, Colombia.**

Vehicle type	No. of vehicles	Overall activity VKT (km/d) / Start-up (#/d)	Emission (ton/yr)							
			Running / Start-up							
			CO	NO <sub>x</sub>	SO <sub>x</sub>	PM <sub>10</sub>	NMVOC	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>
PC	64090	1858610 / 320450	13657.63 /	918.01 /	17.58 /	16.33 /	1159.83 /	189237.64 /	5.95 /	817.56 /
			2244.30	104.69	0.42	4.76	180.18	2664.56	0.65	63.62
2w	60625	1758125 / 363750	14683.40 /	55.09 /	4.96 /	130.97 /	5889.60 /	43128.06 /	0.00 /	1143.62 /
			6858.27	86.05	0.10	52.93	1951.37	1079.96	0.11	299.88
Taxi	2402	379516 /	4341.09 /	243.35 /	1.18 /	5.52 /	135.57 /	48548.11 /	2.58 /	519.35 /
		14412	128.74	5.17	0.01	0.29	8.34	69.03	0.05	15.73
Bus	2367	414225 /	753.81 /	2366.49	1.19 /	354.02 /	177.13 /	118793.06 /	0.89 /	0.00 /
		7101	1.22	/ 4.17	0.00	8.25	0.11	137.28	0.01	0.00
Truck	2528	126400 /	718.88 /	1089.60	0.51 /	164.22 /	143.60 /	50250.95 /	0.33 /	0.00 /
		20224	8.23	/ 17.47	0.01	27.50	0.58	532.11	0.03	0.00
<b>Total</b>	<b>132012</b>	<b>4536876 / 725937</b>	<b>43395.55</b>	<b>4890.10</b>	<b>25.96</b>	<b>764.79</b>	<b>9646.29</b>	<b>454440.76</b>	<b>10.60</b>	<b>2859.76</b>

Emission of PM<sub>10</sub> from vehicular sources was dominated by public transport - buses, with 47% of emissions and trucks (25%). Bus fleet emitted the highest amount of PM<sub>10</sub> (0.36 Gg/yr), in spite of its small percentage in the vehicular fleet (1.8%) (Fig. 2). The use of diesel as fuel in a bus fleet dominated by direct injection and pre-Euro emission control technology (95%), could explain this predominance. A higher efficient technology for emissions reduction in diesel vehicles such as Euro II, only covered 5% of the bus fleet. Other pollutant with higher releases from bus and truck vehicles was NO<sub>x</sub> (48% and 23% of emissions respectively). The use of diesel in vehicles of other large cities has been linked to most of PM emissions and almost 50% of NO<sub>x</sub> releases (D'Angiola et al., 2010; Peñaloza, 2010).

The emission of the most abundant greenhouse gas, CO<sub>2</sub> (454 Gg/yr), were dominated by PC and buses with 42% and 26% respectively (Fig. 2). The PC fleet characterized by 55% of vehicles with multi-point fuel injection technology, suggests efficient combustion reactions, when compared to motorcycles (second largest vehicle-class in the fleet). 2w vehicles are characterized by the use of a carburetor, a less efficient combustion technology. Additionally, PC was the main source of N<sub>2</sub>O and CH<sub>4</sub> pollutants (62% and 31% of total emissions respectively). Another type of vehicle with important releases of CH<sub>4</sub> and N<sub>2</sub>O pollutants was the Taxi category, with 25% and 19% of emissions, respectively. In spite of its low percentage in total fleet (1.8%), these vehicles use predominantly compressed natural gas (CNG) as fuel (Fig. 3), which explains the impact of this type of fuel on the formation of CH<sub>4</sub> and N<sub>2</sub>O gases.

The contribution of start-up patterns was predominantly strong for NMVOC, CO and PM<sub>10</sub>, making 22%, 21% and 12% of total emissions respectively. This pattern was higher in the motorcycle fleet, where start-up emissions reached 32% (CO), 29% (PM<sub>10</sub>) and 25% (NMVOC) of total 2w releases. This result suggests the importance of start-up emissions in Manizales, and the need for a methodology that allows the study of both running and start-up patterns for estimating the vehicular EI in the city.

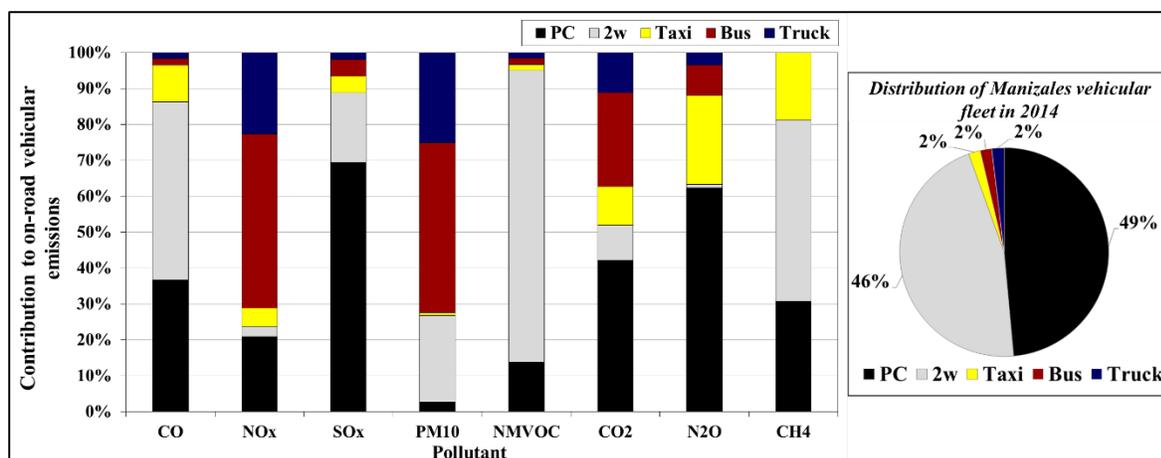


Figure 2. Emission distribution by vehicular type (left) and total on-road vehicular fleet composition (right) in Manizales, Colombia.

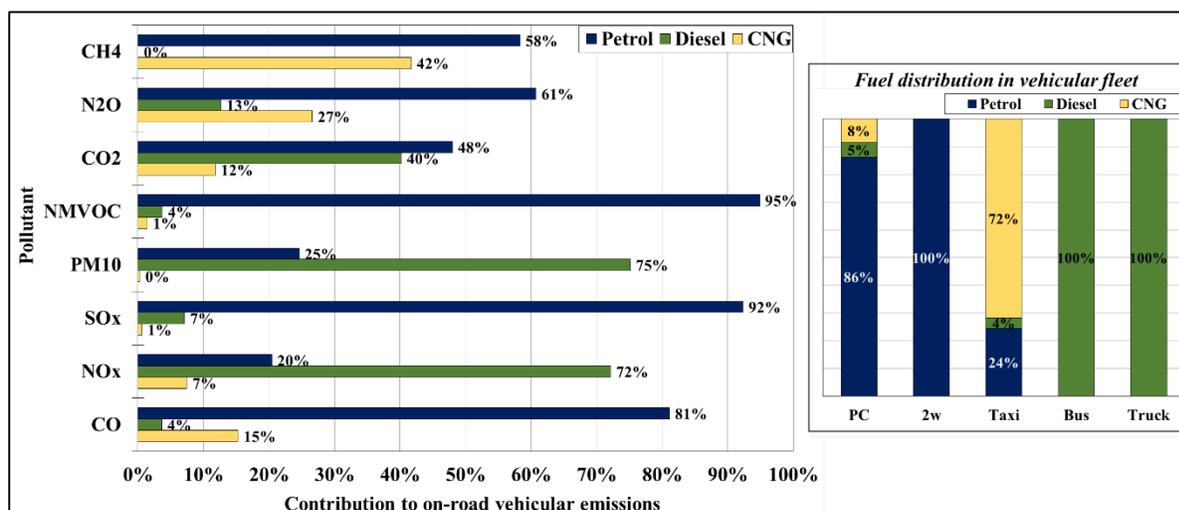


Figure 3. Emission distribution by fuel type from on-road vehicular sources (left) and fuel distribution in vehicular fleet (right) in Manizales, Colombia.

Reports of on-road vehicular emissions in large and medium-sized cities (population less than 1 million inhabitants), were summarized in Table 4. The total flux of pollutants and reported population for the year base of the study were used for the estimation of a per-capita index (PCI) of emission (Fig. 4), in order to analyze the relative impact of on-road vehicular sources in the air quality of Manizales. Results were compared with those obtained in other medium-sized and megacities in the world. Clearly, there are different concerns when comparing EIs, due to not only the high uncertainty involved in activity parameters (such as the total VKT), but also the methodology defined for the estimation (e.g. IVE, COPERT, local EFs and others). However, this exercise could provide general information about pollutant emission trends, and general differences between mid-sized and megacities in terms of vehicular influence in air pollution. Huo et al. (2011) have reported the use of emission PCI for comparing vehicular releases for 22 Chinese cities. The PCI was useful also to analyze Shanghai situation with respect to other countries around the world, and to identify past, current and future trends.

As expected, the medium-sized Andean city of Manizales emitted lower quantities of air pollutants compared to those reported in large cities (e.g. Bogotá and Medellín in Colombia), characterized by its higher population and higher vehicular activity (Table 4). A local pattern of high NMVOC emissions than those reported for NO<sub>x</sub>, are in agreement with other urban areas such as the megacities of Lima and Bogotá (e.g. Peñaloza, 2010; Dawidowski et al., 2014). On the other hand, the PCI for NMVOC in Manizales was the highest among all cities analyzed (Fig. 4), suggesting a high impact of vehicular emissions in the city. Manizales registered a high motorization rate in 2013 with 310 vehicles per 1000 inhabitants. This factor combined with a limited area for growth, encourage the use of motorcycle as an ideal option for mobilization. However, this vehicle-class was characterized by the higher emissions of NMVOC and CO in the city, suggesting the need for policies to regulate its use and to promote the change of old 2-stroke technologies for less pollutant devices such as 4-stroke engines.

Overall, total on-road vehicular emissions in Manizales were higher than those reported in other medium-sized cities (Table 4). This pattern was confirmed when compared emission PCI against those obtained for the medium-sized Chilean cities of Serena-Coquimbo, Antofagasta and Temuco (Fig. 4). Only PM<sub>10</sub> and SO<sub>x</sub> pollutants showed lower levels of PCI in Manizales than those obtained in other medium-sized cities. It is important to consider that the methodology used in this study, allowed the estimation of running and start-up emissions - the last with significant contribution of NMVOC and CO, while the medium-sized Chilean cities only reported running releases. The use of IVE methodology base on VSP estimation, could also represent the effect of a complex topography with hills that put more stress on the engines e common issue in the Andean city of Manizales. According to Rodríguez et al. (2016), VSP is a valuable concept to estimate on-road vehicular emissions and to understand their relationship with driving patterns. In that sense, the relatively high emissions obtained in Manizales are consequence of an estimation that takes into account the unique characteristics of this Andean city, dominated by a complex topography and a small area for development. As it is shown in Fig. 4, PCI of PM<sub>10</sub> (one of the most important pollutants in urban environments) was higher for all medium-sized cities in comparison with that obtained for megacities. This is another result that emphasize the need for EIs in medium-sized cities, where there is a scarcity of information, and where according to United Nations (UN) will be the fastest urban growth of the future (UN, 2014).

**Table 4. Comparison of Manizales on-road vehicular emissions with reports of other large and medium-sized cities around the world.**

City, Country (year base)	Populatio n (1000 inhab.)	Emission (Gg/yr)								Model and type of EI estimation	Reference	
		CO	NO <sub>x</sub>	SO <sub>x</sub>	NM- VOC	PM <sub>10</sub>	CO <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	N <sub>2</sub> O			
Sao Paulo MR, Brazil (SPMR 2014)	20443.1 <sup>a</sup>	162.9	54.3	1.562	34.8	1.5	14391.0				Local EFs (Running)	CETESB, 2014
Shanghai, China (2004)	18500.0	570.6	92.0		77.5	2.6	11700.0				IVE (Running & Start-up)	Wang et al., 2008
Buenos Aires MR, Argentina (BAMR 2006)	16776.2	569.0	81.9	6.600	69.8	6.4	11524.0	10.6	1.04		COPERT (Running & Start-up)	D'Angiola et al., 2010
Buenos Aires MR, Argentina (BAMR 2007)	16776.2	1160.6	105.9	0.650	86.0	3.5	7022.2				IVE (Running & Start-up)	Henriquez, 2007

City, Country (year base)	Populatio n (1000 inhab.)	Emission (Gg/yr)								Model and type of EI estimation	Reference
		CO	NO <sub>x</sub>	SO <sub>x</sub>	NM- VOC	PM <sub>10</sub>	CO <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	N <sub>2</sub> O		
Delhi, India (2012)	13400.0	235.2	81.9			5.8				IVE (Running & Start-up)	Mishra and Goyal, 2014
Lima MR, Perú (LMR 2003)	8482.6	276.2	57.4	5.128	63.1	4.9	4772.8		0.10	LEAP (Running)	Dawidowski et al., 2014
Lima MR, Perú (LMR 2003)	8482.6	1158.0	96.6		120.6	7.2				IVE (Running & Start-up)	Lents et al., 2004a
Bogotá, Colombia (2009)	7259.6	450.0	30.0		60.0	1.1	4800.0			Local EFs (Running)	Behrentz et al., 2009
Bogotá, Colombia (2008)	7155.1	706.9	57.7	13.009	108.0	1.6				Emissens (Running)	Peñaloza, 2010
Bogotá, Colombia (2005)	6840.1	820.0	49.0	2.200	69.0	2.0	4600.0	14.0	0.11	IVE (Running & Start-up)	Giraldo, 2005
Santiago, Chile (2007)	5631.8 <sup>b</sup>	953.0	95.2	0.170	82.7	3.4	10311.9			IVE (Running & Start-up)	Henriquez, 2007
Santiago, Chile (2011)	5631.8 <sup>b</sup>	278.4	34.0	0.116	18.3	8.0				MODEM & COPERT EFs (Running)	MMA, 2012
Medellín (AMVA <sup>c</sup> ), Colombia (2011)	3840.0	134.1	16.2	0.279	11.8	1.1	2588.0			LEAP & IVE EFs (Running)	Toro et al., 2013
Sardinia, Italy (2001)	1600.0	79.5	19.4	0.449	11.5	1.5	3124.0	0.5	0.28	COPERT (Running & Start-up)	Bellasio et al., 2007
<b>Manizales, Colombia (2014)</b>	<b>368.0</b>	<b>43.4</b>	<b>4.9</b>	<b>0.026</b>	<b>9.6</b>	<b>0.8</b>	<b>454.4</b>	<b>2.9</b>	<b>0.01</b>	<b>IVE (Running &amp; Start-up)</b>	<b>This study</b>
La Serena- Coquimbo, Chile (2011)	296.2 <sup>b</sup>	11.2	1.7	0.006	1.1	0.7				MODEM & COPERT EFs (Running)	Ossés de Eicker, et al., 2008; MMA, 2012
Antofagasta, Chile (2011)	285.2 <sup>b</sup>	6.8	1.5	0.006	0.7	1.1				MODEM & COPERT EFs (Running)	Ossés de Eicker, et al., 2008; MMA, 2012
Temuco, Chile (2011)	268.4 <sup>b</sup>	8.4	1.4	0.004	1.7	0.7				MODEM & COPERT EFs (Running)	Ossés de Eicker, et al., 2008; MMA, 2012
Envigado, Colombia (2010)	187.1	6.0	1.5	0.011	0.9	0.1				IVE (Running & Start-up)	Londoño et al., 2011

<sup>a</sup> Population data obtained from: <http://www.imp.seade.gov.br/frontend/#/perfil>.

<sup>b</sup> Population data obtained from: <http://www.observatoriourbano.cl/indurb/index.asp>.

<sup>c</sup> Metropolitan Region of Valle de Aburrá, Colombia (AMVA as their acronyms in Spanish).

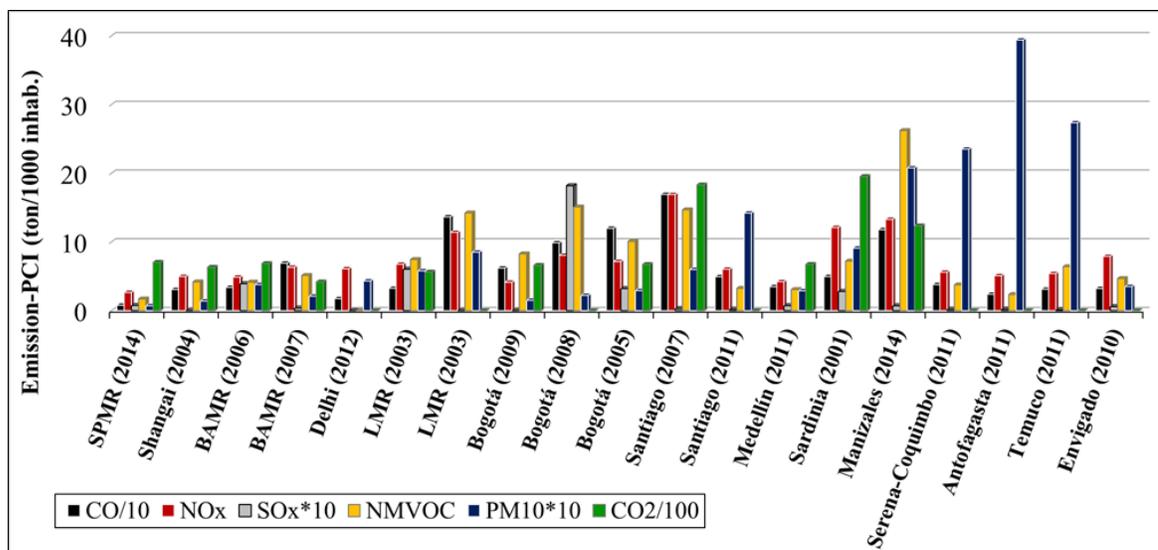


Figure 4. Per-capita index (PCI) of on-road vehicular emission for different cities around the world. References are listed in Table 4 for each city.

### 3.2. Industrial point-source emissions

Emission of particulate matter (PM<sub>10</sub>) and gases (SO<sub>x</sub> and NO<sub>x</sub>) were most significant for food and beverage (FB) processes, covering 63% of total PM<sub>10</sub> industrial point-source emission and around 50% of SO<sub>x</sub> and NO<sub>x</sub> releases (Fig. 5). This sector comprises the majority of facilities (22%) and point sources (24%) evaluated. The second sector with an important contribution of emissions, in spite of its low number of point sources (11%), was scrap metal recycling (SMR). This sector emits 73% of total CO and 47% of NMVOC point-source emissions. The SMR industry reports its main releases associated with the process itself, where scrap metal melting is performed in electric induction furnaces. This kind of emission and other releases that are not linked to the use of fossil fuels, were included in a separate category named as Combustion - Process Related. In Fig. 6 the distribution of pollutants from point-source industrial emissions is shown by type of combustion process. Clearly, the emission of CO and NMVOC is dominated by process-related combustion (such as SMR foundry).

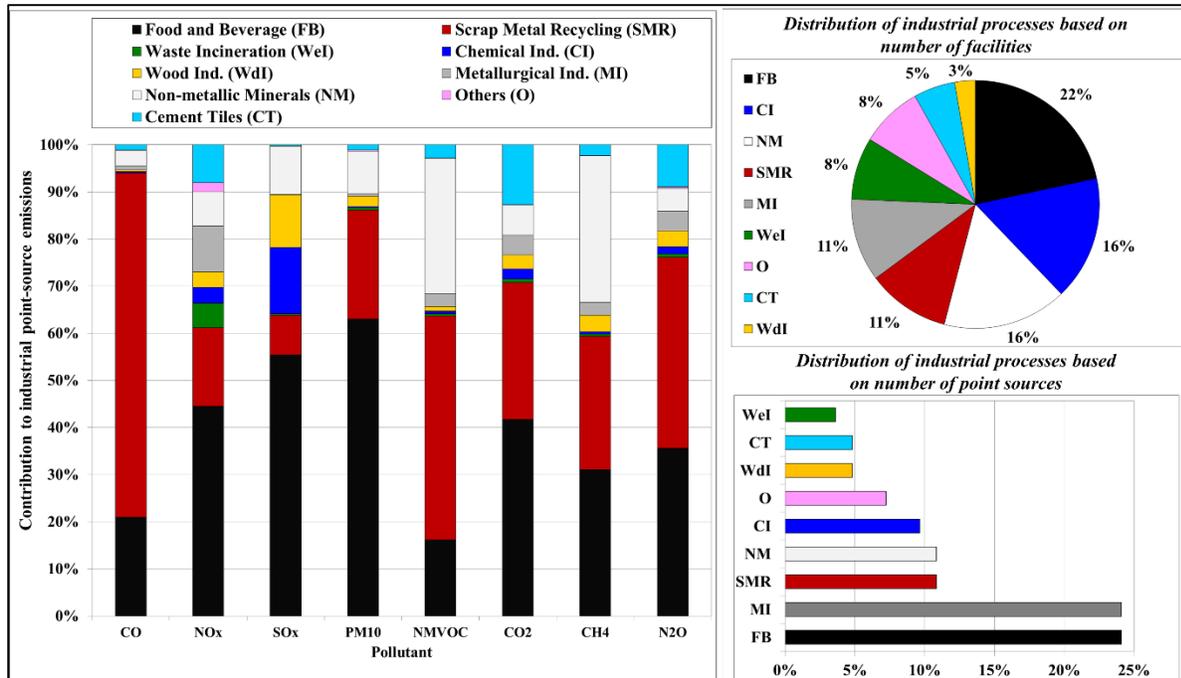


Figure 5. Point-source emission distribution by industrial activity (left). The fraction of each industrial process in total industry of Manizales is shown to the right as a function of number of facilities (upper-right) and number of point sources (lower-right).

Coal consumption was the higher source of PM<sub>10</sub> (86%), SO<sub>x</sub> (62%) and CO<sub>2</sub> (35%), in spite of only 10% of use in total industrial point sources evaluated (Fig. 6). This pattern could be associated to the use of bituminous and sub-bituminous coal, characterized by its sulfur contents between 0.6% and 2% and ash contents between 12% and 16%, respectively (UPME, 2012). The most used source of energy - natural gas (NG) with 55% of point sources - was characterized by higher releases of greenhouse gases N<sub>2</sub>O (59%) and CH<sub>4</sub> (40%), similar pattern than that found in vehicular sources. This result shows the importance of NG as a source of these two gases, which have a significant global warming effect.

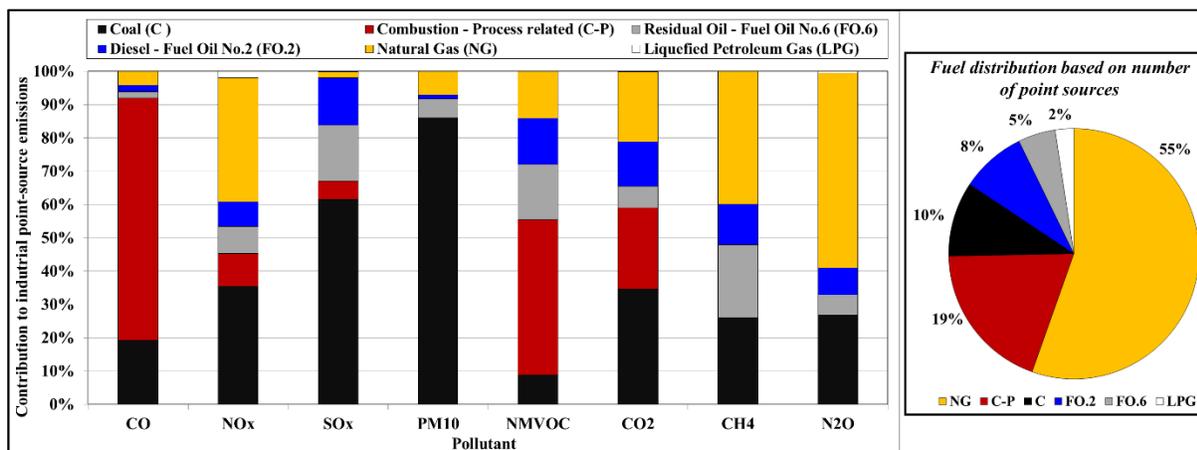


Figure 6. Industrial point-source emissions in Manizales, Colombia by type of combustion process (left). Distribution of fuel type by total industrial point sources is shown to the right.

#### 4. Conclusions

Emissions from anthropogenic sources (point-source industrial + on-road vehicular) in the medium-sized city of Manizales were dominated by vehicular activity, with more than 90% of total emissions for the majority of air pollutants estimated. Only the emission of SO<sub>x</sub> was higher from industrial point sources reaching 81% of the total emission. Higher vehicular releases were obtained in the city for CO (43.4 Gg/yr) followed by NMVOC with 9.6 Gg/yr (among criteria and NMVOC pollutants). The use of motorcycles was one of the major sources of these pollutants, in a vehicle-class characterized by 2-stroke engines in 54% of motorcycle fleet, and the use of petrol as fuel. This result was confirmed with the estimation of an emission PCI for NMVOC in Manizales. This PCI was higher than that obtained for other medium-sized and megacities such as Bogotá, Lima and Sao Paulo. Bus fleet emitted the highest amount of PM<sub>10</sub> (0.36 Gg/yr) and NO<sub>x</sub> (2.4 Gg/yr), in spite of its small percentage in the vehicular fleet (1.8%). This result was associated with the use of diesel as fuel in a bus fleet dominated by direct injection and pre-Euro emission control technology.

In terms of industrial point-source emissions, PM<sub>10</sub>, SO<sub>x</sub> and NO<sub>x</sub>, were most significant for food and beverage (FB) processes, covering 63% of total PM<sub>10</sub> release and around 50% for SO<sub>x</sub> and NO<sub>x</sub>. The second industry with important contribution, in spite of its low number of point sources (11%), was scrap metal recycling (SMR). This sector emitted 73% of total CO and 47% of NMVOC industrial emissions. Finally, coal consumption was the higher source of PM<sub>10</sub>, SO<sub>x</sub> and CO<sub>2</sub>.

The importance of start-up patterns especially for NMVOC, CO and PM<sub>10</sub>, which comprised 22%, 21% and 12% of total on-road vehicular emissions respectively, indicate the need for a methodology that allows the study of both running and start-up emission patterns in the city. Furthermore, the unique characteristics of Manizales, dominated by a complex topography in a small area for development, suggest that a methodology based on VSP could estimate realistic emissions. Taking into account that variables such as mountain geographies (slope) and acceleration are incorporated in the estimations. This study supports quantitatively previous hypothesis that established on-road vehicular sources as the major anthropogenic source of air pollution in the medium-sized Andean city of Manizales.

These results can add a new information to previous studies about pollutant emissions in the region and establish a base line of knowledge in mountainous ecosystems in the Andean Region of Colombia. The results obtained in this study could also be applied to improve the air pollution management system in the region and contribute to local public policy decisions.

#### Acknowledgments

The authors acknowledge Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, and the regional environmental authority (CORPOCALDAS) for supporting this project through “Convenio Interadministrativo de Asociación 130-2014”. The authors also acknowledge the economic support given by Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación (COLCIENCIAS) through “Programa Doctoral Crédito-Beca Colciencias 528” and “Programa Jóvenes Investigadores e Innovadores 2015, Facultad de Ingeniería y Arquitectura - Convenio Especial de Cooperación 567-2015”. Part of this work was conducted during the Sabbatical Fellow of Professor Beatriz Aristizábal, sponsored by Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales - Colombia. Special thanks to researchers from Air Quality Research Group of Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá, for their collaboration and valuable contributions.

## References

- Alonso, M.F., Longo, K.M., Freitas, S.R., da Fonseca, R.M., Marécal, V., Pirre, M., Klenner, L.G., 2010. An urban emissions inventory for South America and its application in numerical modeling of atmospheric chemical composition at local and regional scales. *Atmos. Environ.* 44, 5072-5083. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.09.013>.
- Arellano C, 2013. Condições meteorológicas e níveis de poluição na Região Metropolitana de Lima – Perú. In Portuguese. Universidad de Sao Paulo. Sao Paulo, Brasil (Master Thesis).
- Aristizábal, B.H., González, C.M., Morales, L., Abalos, M., Abad, E., 2011. Polychlorinated dibenzo-p-dioxin and dibenzofuran in urban air of an Andean city. *Chemosphere* 85, 170-178. <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemosphere.2011.06.035>.
- Behrentz, E., Sánchez, N., Fandiño, M., Rodríguez, P., 2009. Elementos Técnicos del Plan Decenal de Descontaminación de Bogotá. Parte 2: Inventario de Emisiones Provenientes de Fuentes Fijas y Móviles (In Spanish). Contrato de Ciencia y Tecnología No. 347 de 2006 entre la Secretaría Distrital de Ambiente de Bogotá y el Grupo de Estudios en Sostenibilidad Urbana y Regional de la Universidad de Los Andes. Bogotá, Colombia.
- Bellasio, R., Bianconi, R., Corda, G., Cucca, P., 2007. Emission inventory for the road transport sector in Sardinia (Italy). *Atmos. Environ.* 41, 677-691. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.09.017>.
- CETESB (Companhia Ambiental de Estado de São Paulo), 2014. Emissões veiculares no estado de São Paulo 2014. In Portuguese. Available online at: [http://veicular.cetesb.sp.gov.br/wp-content/uploads/sites/35/2013/12/Relat%C3%B3rio-emiss%C3%B5es-veiculares-2014\\_VERS%C3%83O-DIGITAL\\_01.09.pdf](http://veicular.cetesb.sp.gov.br/wp-content/uploads/sites/35/2013/12/Relat%C3%B3rio-emiss%C3%B5es-veiculares-2014_VERS%C3%83O-DIGITAL_01.09.pdf). Accessed February 2016.
- Chen, C., Jing, J., Huang, C., Pan, H., Wang, H., Dai, Y., Huang, H., Zhao, J., Chen, G., Wang, B., Qian, H., Dai, H., Lin, H., Wang, S., 2005. Transportation situation and traffic air pollution status in Shanghai. AEI-SAES-Re.G-0309-07094/00138.07. Shanghai Academy of Environmental Sciences. China.
- Davis, N., Lents, J., Osses, M., Nikkila, N., Barth, M., 2005. Development and application of an international vehicle emissions model. Transportation Research Board 81st Annual Meeting, Washington D.C. Available online at: [http://www.issrc.org/ive/downloads/presentations/IVE\\_TRB\\_2005.pdf](http://www.issrc.org/ive/downloads/presentations/IVE_TRB_2005.pdf). Accessed March 2015.
- D'Angiola, A., Dawidowski, L.E., Gómez, D.R., Osses, M., 2010. On-road traffic emissions in a megacity. *Atmos. Environ.* 44, 483-493. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.11.004>.
- Dawidowski, L.E., Sánchez-Ccoyllo, O., Alarcón, N., 2014. Estimación de emisiones vehiculares en Lima Metropolitana. Informe final. In Spanish. SENAMHI/SAEMC. Lima, Perú.
- Ecopetrol, n.d. Catálogo de productos – Hidrocarburos. In Spanish. Available online at: [http://www.ecopetrol.com.co/especiales/Catalogo\\_de\\_Productos/](http://www.ecopetrol.com.co/especiales/Catalogo_de_Productos/) Accessed April 2014.
- Gallardo, L., Escribano, J., Dawidowski, L., Rojas, N., Andrade, M.F., Osses, M., 2012. Evaluation of vehicle emission inventories for carbon monoxide and nitrogen oxides for Bogotá, Buenos Aires, Santiago, and Sao Paulo. *Atmos. Environ.* 47, 12-19. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.11.051>.
- Giraldo, L.A., 2005. Estimación del inventario de emisiones por Fuentes móviles para la ciudad de Bogotá e identificación de variables pertinentes. In Spanish. Universidad de Los Andes. Bogotá, Colombia (Master Thesis).
- Golub, E., Klytchnikova, I., Sanchez-Martinez, G., Belausteguigoitia, J.C., 2014. Environmental health costs in Colombia: the changes from 2002 to 2010. Latin America and Caribbean region. Environment and Water Resources. Occasional paper series. Washington, DC. World Bank Group. Available online at: <http://documents.worldbank.org/curated/en/657631468047104545/Environmental-health-costs-in-Colombia-the-changes-from-2002-to-2010> Accessed September 2016.
- González, C.M., Aristizábal, B.H., 2012. Acid rain and particulate matter dynamics in a mid-sized Andean city: The effect of rain intensity on ion scavenging. *Atmospheric Environment* 60, 164-171. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.05.054>.
- González, C.M., Cortés, J., Aristizábal, B.H., 2015. Influence of meteorology and source variation on airborne PM10 levels in a high relief tropical Andean city. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia* 74, 200-212.
- Goyal, P., Mishra, D., Kumar, A., 2013. Vehicular emission inventory of criteria pollutants in Delhi. SpringerPlus 2013, 2:216.
- Guo, H., Zhang, Q., Shi, Y., Wang, D., 2007. Evaluation of the International Vehicle Emission (IVE) model with on-road remote sensing measurements. *J. Environ. Sci.* 19, 818-826.
- Henríquez, P., 2007. Estudio comparativo de actividad vehicular y modelación de emisiones para Santiago y Buenos Aires. In Spanish. Universidad de Chile. Santiago de Chile, Chile (Bachelor Thesis).

Huggel, C., Scheel, M., Albrecht, F., Andres, N., Calanca, P., Jurt, C., Khabarov, N., Mira-Salama, D., Rohrer, M., Salzmann, N., Silva, Y., Silvestre, E., Vicuña, L., Zappa, M., 2015. A framework for the science contribution in climate adaptation: Experiences from science-policy processes in the Andes. *Environ. Sci. Policy* 47, 80-94. <http://dx.doi.org/10.1016/j.envsci.2014.11.007>.

Huo, H., Zhang, Q., He, K., Yao, Z., Wang, X., Zheng, B., Streets, D.G., Wang, Q., Ding., 2011. Modeling vehicle emissions in different types of Chinese cities: Importance of vehicle fleet and local features. *Environ. Pollut.* 159, 2954-2960. <http://dx.doi.org/10.1016/j.envpol.2011.04.025>.

ISSRC (International Sustainable Research Center), 2008a. IVE Model Users Manual Version 2.0. Available online at: <http://www.issrc.org/ive/downloads/manuals/UsersManual.pdf>. Accessed January 2014.

ISSRC (International Sustainable Research Center), 2008b. International Vehicle Emissions Model. Attachment D Field Data Collection Activities. Available online at: [http://www.issrc.org/ive/downloads/manuals/AttachD\\_DC.pdf](http://www.issrc.org/ive/downloads/manuals/AttachD_DC.pdf). Accessed March 2014.

ISSRC (International Sustainable Research Center), 2008c. International Vehicle Emissions Model. Attachment C Characterizing Emission Variations due to Driving Behavior from On-Road Vehicles. Available online at: [http://www.issrc.org/ive/downloads/manuals/AttachC\\_DA.pdf](http://www.issrc.org/ive/downloads/manuals/AttachC_DA.pdf). Accessed March 2014.

Jimenez-Palacios, J.L., 1999. Understanding and Quantifying Motor Vehicle Emissions with Vehicle Specific Power and TILDAS Remote Sensing. Massachusetts Institute of Technology (Doctorate Thesis).

Lents, J., Davis, N., Nikkila, N., Osses, M., 2004a. Lima vehicle activity study. Available online at: <http://www.issrc.org/ive/downloads/reports/LimaPeru.pdf>. Accessed February 2016.

Lents, J., Davis, N., Nikkila, N., Osses, M., 2004b. Sao Paulo vehicle activity study. Available online at: <http://www.issrc.org/ive/downloads/reports/SaoPauloBrazil.pdf>. Accessed February 2016.

Londoño, J., Correa, M.A., Palacio, C.A., 2011. Estimación de las emisiones de contaminantes Atmosféricos provenientes de fuentes móviles en el área urbana de Envigado, Colombia. In Spanish. *Revista EIA* 16, 149-162.

Liu, H., He, K., Wang, Q., Huo, H., Lents, J., Davis, N., Nikkila, N., Chen, C., Osses, M., He, C., 2007. Comparison of Vehicle Activity and Emission Inventory between Beijing and Shanghai. *J. Air & Waste Manag. Assoc.* 57:10, 1172-1177. <http://dx.doi.org/10.3155/1047-3289.57.10.1172>.

Manizales Cómo Vamos, 2013. Informe de calidad de vida Manizales. In Spanish. Available online at: [http://manizalescomovamos.org/?page\\_id=2278](http://manizalescomovamos.org/?page_id=2278). Accessed February 2016.

MAVDT (Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial), 2008. Resolución número 909. Por la cual se establecen las normas y estándares de emisión admisibles de contaminantes a la atmósfera por fuentes fijas y se dictan otras disposiciones. In Spanish. Available online at: <http://www.ideam.gov.co/web/contaminacion-y-calidad-ambiental/emisiones-por-fuentes-fijas>. Accessed September 2016.

MAVDT (Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial), 2010. Protocolo para el control y vigilancia de la contaminación atmosférica generada por fuentes fijas. In Spanish. Available online at: <http://www.ideam.gov.co/web/contaminacion-y-calidad-ambiental/emisiones-por-fuentes-fijas>. Accessed September 2016.

Mishra, D., Goyal, P., 2014. Estimation of vehicular emissions using dynamic emission factors: A case study of Delhi, India. *Atmos. Environ.* 98, 1-7. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.08.047>.

MMA (Ministerio del Medio Ambiente de Chile), 2012. Reporte 2005-2011 del Registro de Emisiones y Transferencias de Contaminantes, RETC. In Spanish. Available online at: [http://www.retc.cl/wp-content/uploads/2015/07/articles-57080\\_reporte\\_2005\\_2011.pdf](http://www.retc.cl/wp-content/uploads/2015/07/articles-57080_reporte_2005_2011.pdf). Accessed May 2016.

Ossés de Eicker, M., Zah, R., Triviño, R., Hurni, H., 2008. Spatial accuracy of a simplified disaggregation method for traffic emissions applied in seven mid-sized Chilean cities. *Atmos. Environ.* 42, 1491-1502. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.10.079>.

Parra, R., Jiménez, P., Baldasano, J.M., 2006. Development of the high spatial resolution EMICAT2000 emission model for air pollutants from the north-eastern Iberian Peninsula (Catalonia, Spain). *J. Environ. Pollut.* 140, 200-219. <http://dx.doi.org/10.1016/j.envpol.2005.07.021>.

Peñaloza, N.E., 2010. Distribución espacial y temporal del inventario de emisiones provenientes de las fuentes móviles y fijas de la ciudad de Bogotá, D.C. In Spanish. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia (Master Thesis).

Pulles, T., Heslinga, D., n.d. The Art of Emission Inventorying. TNO-Environment and Geosciences. Available online at: [http://www.csb.gov.tr/db/necen/editordosya/file/NEC/CollectER\\_Training/The\\_Art\\_of\\_Emission\\_Inventorying.pdf](http://www.csb.gov.tr/db/necen/editordosya/file/NEC/CollectER_Training/The_Art_of_Emission_Inventorying.pdf). Accessed April 2016.

- Rodríguez, R.A., Virguez, E.A., Rodríguez, P.A., Behrentz, E., 2016. Influence of driving patterns on vehicle emissions: A case study for Latin American cities. *Transp. Res. Part D* 43, 192–206. <http://dx.doi.org/10.1016/j.trd.2015.12.008>.
- Rojas, A., 2015. Estimación de emisiones de contaminantes provenientes de fuentes móviles en la jurisdicción CAR. In Spanish. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia. Available online at: <http://www.bdigital.unal.edu.co/52666/7/AuraRojas.2015.pdf>. Accessed February 2016 (Master Thesis).
- Saïde, P., Zah, R., Osses, M., Ossés de Eicker, M., 2009. Spatial disaggregation of traffic emission inventories in large cities using simplified top-down methods. *Atmos. Environ.* 43, 4914–4923. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.07.013>.
- Saïde, P., Bocquet, M., Osses, A., Gallardo, L., 2011. Constraining surface emissions of air pollutants using inverse modelling: method intercomparison and a new two-step two-scale regularization approach. *Tellus* 63B, 360–370. <http://dx.doi.org/10.1111/j.1600-0889.2011.00529.x>.
- Seinfeld, J.H., Pandis, S.N., 2006. *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, New Jersey.
- Tuïa, D., Ossés de Eicker, M., Zah, R., Osses, M., Zarate, E., Clappier, A., 2007. Evaluation of a simplified top-down model for the spatial assessment of hot traffic emissions in mid-sized cities. *Atmos. Environ.* 41, 3658–3671. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.12.045>.
- Toro, M.V., Serna, J., Álvarez, N.W., Sánchez, C.G., Ospina, F.E., Quiceno, D.M., Zapata, J.D., 2010. Simulaciones especiales tarea 1: Optimización del inventario de emisiones atmosféricas. In Spanish. Convenio de Asociación No. 543 de 2008. Medellín, Colombia.
- Toro, M.V., Molina, E., García, P., Quiceno, D.M., Londoño, A., Acevedo, L.F., 2013. Inventario de Emisiones Atmosféricas del Valle de Aburrá, año base 2011. In Spanish. Convenio de Asociación No. 243 de 2012. Medellín, Colombia.
- UN (United Nations), 2014. *World Urbanization Prospects: The 2014 Revision, Highlights*. Department of Economic and Social Affairs, Population Division. New York.
- UPME (Unidad de Planeación Minero Energética), 2012. *La cadena del Carbón*. In Spanish. Available online at: [http://www.upme.gov.co/Docs/Cadena\\_Carbon\\_2012.pdf](http://www.upme.gov.co/Docs/Cadena_Carbon_2012.pdf). Accessed August 2014.
- US EPA (United States Environmental Protection Agency), 1984. Method 40. Chapter I. Subchapter C. CFR Part. 60 - Standards of performance for new stationary sources. EPA Federal Register - Proposed Rules. USA.
- US EPA (United States Environmental Protection Agency), 1995. *Compilation of Air Pollutant Emission Factors, Volume 1: Stationary Point and Area Sources*. Available online at: <https://www3.epa.gov/ttnchie1/ap42/>. Accessed January 2015.
- US EPA (United States Environmental Protection Agency), 2013. *Recommended Procedures for Development of Emissions Factors and Use of the WebFIRE Database*. Available online at: <https://www3.epa.gov/ttn/chie/efpac/procedures/procedures81213.pdf>. Accessed August 2015.
- US EPA (United States Environmental Protection Agency), n.d. How does an emissions inventory contribute to the air quality management process? Available online at: <https://www.epa.gov/air-quality-management-process/emissions-inventory#contrib>. Accessed May 2016.
- Vivanco, M.G., Andrade, M., 2006. Validation of the emission inventory in the Sao Paulo Metropolitan Area of Brazil, based on ambient concentrations ratios of CO, NMOG and NO<sub>x</sub> and on a photochemical model. *Atmos. Environ.* 40, 1189–1198. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.10.041>.
- Velasco, M., 2015. *Evaluación de la concentración y caracterización preliminar del PM<sub>10</sub> en la ciudad de Manizales*. In Spanish. Universidad del Valle. Cali, Colombia (Master Thesis).
- Wang, H., Chen, C., Huang, C., Fu, L., 2008. On-road vehicle emission inventory and its uncertainty analysis for Shanghai, China. *Sci. Total Environ.* 398, 60–67. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2008.01.038>.
- World Bank, 2006. *Republic of Colombia. Mitigating Environmental Degradation to Foster Growth and Reduce Inequality*. Report No. 36345-CO. Environmentally and Socially Sustainable Development Department. Available online at: [http://www-wds.worldbank.org/external/default/WDSContentServer/WDSP/IB/2006/06/27/000160016\\_20060627101617/Rendered/PDF/363450CO.pdf](http://www-wds.worldbank.org/external/default/WDSContentServer/WDSP/IB/2006/06/27/000160016_20060627101617/Rendered/PDF/363450CO.pdf). Accessed May 2016.
- Zárate, E., Belalcázar, L.C., Clappier, A., Manzi, V., Van den Bergh, H., 2007. Air quality modelling over Bogota, Colombia: Combined techniques to estimate and evaluate emission inventories. *Atmos Environ.* 41, 6302–6318. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.03.011>.

## 2.5.2. DESAGREGACIÓN ESPACIOTEMPORAL DEL INVENTARIO DE EMISIONES POR FUENTES MÓVILES EN RUTA

Los resultados obtenidos en la desagregación espaciotemporal del inventario de emisiones por fuentes móviles en ruta se consolidaron el siguiente manuscrito que se encuentra en proceso de revisión en la revista internacional *Atmospheric Environment*. El material suplementario puede consultarse en el Anexo E.

### SPATIAL AND TEMPORAL DISAGGREGATION OF THE ON-ROAD VEHICLE EMISSION INVENTORY IN A MEDIUM-SIZED ANDEAN CITY. COMPARISON OF GIS-BASED TOP-DOWN METHODOLOGIES

C.D. Gómez<sup>a\*\*</sup>, C.M. González<sup>a</sup>, M. Osses<sup>b</sup>, B.H. Aristizábal<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup>Hydraulic Engineering and Environmental Research Group, Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, Cra 27 64-60 Bloque H Palogrande, Manizales, Colombia

<sup>b</sup>Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Vicuña Mackenna 3939, Santiago, Chile

*Manuscrito en proceso de evaluación en la revista internacional Atmospheric Environment*

#### Abstract

Emission data is an essential tool for understanding environmental problems associated with sources and dynamics of air pollutants in urban environments, especially those emitted from vehicular sources. There is a lack of knowledge about the estimation of air pollutant emissions and particularly its spatial and temporal distribution in South America, mainly in medium-sized cities with population less than one million inhabitants. This work performed the spatial and temporal disaggregation of the on-road vehicle emission inventory (EI) in the medium-sized Andean city of Manizales, Colombia, with a spatial resolution of 1km x 1km and a temporal resolution of 1h. A reported top-down methodology, based on the analysis of traffic flow levels and road network distribution, was applied. Results obtained allowed the identification of several hotspots of emission at the downtown zone and the residential and commercial area of Manizales. Downtown exhibited the highest percentage contribution of emissions normalized by its total area, with values equal to 6% and 5% of total CO and PM<sub>10</sub> emissions per km<sup>2</sup> respectively. These indexes were higher than those obtained in residential-commercial area with values of 2%/km<sup>2</sup> for both pollutants. Temporal distribution showed strong relationship with driving patterns at rush hours, as well as an important influence of passenger cars and motorcycles in emissions of CO both at downtown and residential-commercial areas, and the impact of public transport in PM<sub>10</sub> emissions in the residential-commercial zone. Considering that detailed information about traffic counts and road network distribution is not always available in medium-sized cities, this work compares other simplified top-down methods for spatially assessing the on-road vehicle EI. Results suggested that simplified methods could underestimate the spatial allocation of downtown emissions, a zone dominated by high traffic of vehicles. The comparison between simplified methods based on total traffic counts and road density distribution suggested that the use of total traffic counts in a simplified form could enhance higher uncertainties in the spatial disaggregation of emissions. Results obtained could add new information that help to improve the air pollution management system in the city and contribute to local public policy decisions. Additionally, this work provides appropriate resolution emission fluxes for ongoing research in atmospheric modeling in the city, with the aim to improve the understanding of transport, transformation and impacts of pollutant emissions in urban air quality.

## 1. Introduction

The growth of urban centers brings great pressure on human health and the environment with continuous emission of pollutants such as particulate matter with an aerodynamic diameter less than  $10\mu\text{m}$  ( $\text{PM}_{10}$ ), carbon monoxide (CO), sulfur oxides ( $\text{SO}_x$ ), nitrogen oxides ( $\text{NO}_x$ ) and non-methane volatile organic compounds (NMVOCs) (Dalvi et al., 2006). Direct impacts of these pollutants on human health have mainly related with respiratory diseases such as asthma and lung inflammation, and different allergies including allergic asthma and rhinitis (Kinney, 2008). The episodes of high levels of air pollutants, especially in emerging countries, are associated with increasing activity rates in transportation (D'Angiola et al., 2010; Tuia et al., 2007).

Emission data is an essential tool for understanding environmental problems associated with sources of air pollutants, establishing prioritized regulatory actions and studying dynamics and impacts of pollutants emitted to the atmosphere (Pulles and Heslinga, 2009; US EPA, n.d.). Exposure to air pollution hotspots for a study area can be determined in an analysis of the emissions distribution at high spatial resolution. In this way, scientific application can be applied to policymaking in the development of emission reduction strategies (Shu and Lam, 2011).

To establish efficient air pollution reduction strategies, it is important for the emission inventory (EI) to locate the emissions in every cell in the domain and to establish the time distribution of emissions (Costa and Baldasano, 1996); however, for vehicular emissions this task is difficult because the sources are in constant movement (Parra et al., 2006). Information such as number and type of vehicles, traffic and road density, could be useful to distribute in time and space the EI. There are two main approaches for disaggregate vehicular emissions: bottom-up and top-down.

Bottom-up approaches are the most accurate way to build an on-road vehicle EI, allowing emissions estimation per segment of the road. This method is commonly applied in industrialized countries and megacities considering that the necessary detailed information is usually available. These approaches need information of traffic flow in every segment of the road network; hence, a traffic model is needed. However, traffic model implementation is expensive, time demanding and involve high technical skills. Traffic models are not usually accessible in medium-sized cities (Tuia et al., 2007), which are characterized by a high urban growth during the last decades (UN, 2014), but with a lack of planning and knowledge about the dynamics of its emissions from the vehicle fleet.

Simple disaggregation methods, called top-down, comprise a good option for medium-sized cities in the disaggregation of its EIs (Tuia et al., 2007). The top-down approach is based on the total amount of traffic emissions in the study area. Such emissions are calculated as a function of the local vehicle fleet registered and the average annual mileage (Ossés de Eicker et al., 2008). In order to calculate total traffic emissions, EI models have been developed. For example, the International Vehicle Emissions (IVE) Model (ISSRC, 2008) was created to estimate traffic emissions for a specific area, especially in emerging nations, where availability of information is limited.

In the top-down approach, the total vehicular emissions are spatially distributed from a coarse geographic area to finer grid cells (e.g.  $1\text{km} \times 1\text{km}$  resolution), using specific statistical data that represent local distribution patterns, e.g. population, traffic and road density. The accuracy of the disaggregated emission inventory depends on the quality of the specific statistical data (Loibl et al., 1993), which is the base for the estimation of allocation or disaggregation factors (DFs) (Shu and Lam, 2011). DFs are obtained from normalized weights for each cell in the EI domain based on specific information (e.g. the traffic flow in a cell over the total traffic flow in a day for the study area) (Saide et al., 2009; Shu and Lam, 2011).

The use of top-down approaches has been reported in South America, particularly in Chile, where the emissions in some medium-sized cities (e.g. Valparaíso, Temuco, Concepción) and megacities such as Santiago, have been spatially disaggregated using road density factors. Results obtained on these cities were compared with high-resolution bottom-up emission inventories, showing that top-down approaches based on road density presented a spatial accuracy that decreases with increments in size and complexity of the study area. However, conclusions of these studies suggest that results can be improved if other factors with information of vehicular behavior, e.g. traffic counts and average speed, are included in the analysis (Ossés de Eicker et al., 2008; Saide et al., 2009; Tuia et al., 2007).

Different methods have been published for distributing emissions following a top-down approach. These techniques use variables such as land use and population density maps, traffic counts, simplified and complete road networks (Saide et al., 2009). The combinations of these variables could improve the disaggregation of total emissions by assigning weighting factors of intensity of traffic activity in different parts of the city. This analysis can be done for each type of road allowing the distribution of emissions separately by road and type of vehicle (Ossés de Eicker et al., 2008). The top-down approach is therefore less time and resource-consuming and more practical than the bottom-up approach due to the use of simple specific statistical data instead of complex traffic models (Costa and Baldasano, 1996).

In the application of the top-down methodology for distributing vehicular emissions, the use of geographic information systems (GIS) allows the management, storage and visualization of the maps in an efficient way (Gkatzoflias et al., 2013). These systems provide accuracy and consistency to the EIs and constitute them more accessible and understandable. GIS is a very effective way to store and manipulate spatial data, verify its accuracy, and provide detailed information for both scientific community and policy makers (Gaffney, 2002). The use of GIS in transportation and management was widespread in the 1980s (Thill, 2000). In the 1990s the application of GIS become to be important in air quality modeling and management (Dalvi et al., 2006).

There is a lack of knowledge about air pollutants emissions and specially its spatial and temporal distribution in South America, mainly in medium-sized cities with population less than one million inhabitants. Main efforts have been made in megacities such as Santiago in Chile, which estimated its total emissions (Henríquez, 2007; MMA, 2012) and performed the spatial distribution of on-road vehicular emissions (Saide et al., 2009; MIDEPLAN, 2010; Gallardo et al., 2012). In Buenos Aires, Argentina, total emissions estimation and its spatial distribution was reported (Henríquez, 2007; D'Angiola et al., 2010), and recently, Puliafito et al. (2015) reported a top-down approach for developing a distributed high-resolution road transport EI for the whole country. In Sao Paulo, Brazil, annual fluxes of emissions were reported (CETESB, 2014) and disaggregation of EI have been applied in numerical modelling (Vivanco and Andrade, 2006; Vara-Vela et al., 2016). In Colombia, the studies have focused in large urban areas such as Bogotá, the capital of Colombia, with the estimation of total emissions of on-road vehicular and industrial point-sources (e.g. Giraldo (2005); Rodríguez and Behrentz (2009)) and its distribution in space and time (Peñaloza, 2010). Another example is the city of Medellín, where EI from area, on-road and point sources were reported and updated periodically (Toro et al., 2010; 2013). However, studies in Colombian medium-sized cities which estimate and analyze distribution and hotspots of vehicular emissions are scarce.

Manizales is a medium-sized Colombian Andean city (urban population: 368.000 inhabitants) located on the Central Cordillera of the Andes at 2150 m above sea level. The city has characteristics that enhance urban air pollution, such as a high urban population density (~6800 inhabitants/km<sup>2</sup>) and a high motorization rate (310 vehicles per 1000 inhabitants in 2013), higher value than that registered in the megacity of Bogotá, with 9'300.000 inhabitants and 294 vehicles per 1000 inhabitants in the same year (Manizales Cómo Vamos, 2013). The urban area of Manizales has a

mountain-ridge topography that limits the area for growth, with a road infrastructure characterized by steep streets and a mean road network slope of 8% (Escobar and Garcia, 2012). Total emissions of criteria pollutants, NMVOC and greenhouse gases (GHG) obtained from the application of IVE Model and its methodology in Manizales were estimated (González et al., 2017). The study reported that vehicular activity emitted more than 90% of total emissions for most air pollutants evaluated. The emissions were estimated in terms of total annual fluxes (ton/year) in the urban area of the city and 2014 as year base, but the disaggregation of EI with the analysis of hotspots and critical areas of vehicular emissions was not made.

The aim of this work was to apply a reported top-down method based on the analysis of traffic flow levels and road network distribution using GIS technics in the spatial and temporal disaggregation of the reported on-road vehicle EI of the medium-sized Andean city of Manizales (González et al., 2017). Analysis of hotspots from vehicular emissions were performed in the urban zone of the city in a domain with a resolution of 1km x 1km. Furthermore, this work compares other simplified top-down methods for spatially assessing the EI. This evaluation was performed for defining if these less demanding technics could give reasonable results against the top-down base method, allowing a faster and simpler emission disaggregation not only in Manizales, but also in those medium-sized cities around the world, where the availability of information is not always periodically reported and sometimes difficult to obtain.

## 2. Materials and methods

### 2.1. Background emissions and study area

Top-down approach requires specific information about the study area including the total EI and spatially distributed data directly related with the emissions such as the road network, traffic data or population patterns (Loibl et al., 1993). A total on-road vehicular emission inventory was estimated in Manizales (2014 as base year) using the IVE model (González et al., 2017). This EI was obtained from a field data campaign performed to acquire information about dynamic vehicle fleet composition, vehicle technology distribution, driving and engine start/stop patterns. The study considered five vehicle categories: passenger cars (PC), motorcycles (2w), bus, taxi, and trucks. An analysis by sectors was performed for passenger cars and motorcycles to obtain emissions of these vehicles in highway (Hwy), arterial (Art) and residential (Res) roads. Results shown that passenger cars and motorcycles were the main emitters of CO, NMVOCs and SO<sub>x</sub>, with 15902 and 21542 Gg/yr of CO, 1340 and 7841 Gg/yr of NMVOCs and 18 and 5 Gg/yr of SO<sub>x</sub> respectively. These two vehicle categories involved 95% of vehicular fleet, which comprised 132012 vehicles in 2014. On the other hand, the public transport - buses - was the highest emitter of NO<sub>x</sub> (2371 Gg/yr) and PM<sub>10</sub> (362 Gg/yr). Table 1 summarizes the emissions of the main pollutants reported for the different vehicle categories considered in the study. For passenger cars and motorcycles, emissions are shown for each type of road. This EI was used to estimate the emission by cell using the disaggregation methodology.

**Table 1. Criteria pollutant and NMVOC emissions from on-road vehicular sources in Manizales during 2014. Values obtained from Gonzalez et al. (2017).**

Vehicle category	Road type	Emissions, Gg/yr – kg/day				
		CO	NMVOC	NO <sub>x</sub>	SO <sub>x</sub>	PM <sub>10</sub>
PC	Hwy	8101 – 25284	668 – 2085	551 – 1720	10 – 32	9 – 30
	Art	6766 – 21117	581 – 1814	407 – 1271	7 – 21	10 – 31
	Res	1035 – 3230	91 – 283	64 – 201	1 – 3	2 – 5
	<i>Total</i>	<i>15902 – 49631</i>	<i>1340 – 4182</i>	<i>1023 – 3192</i>	<i>18 – 56</i>	<i>21 – 66</i>

Vehicle category	Road type	Emissions, Gg/yr – kg/day				
		CO	NM VOC	NO <sub>x</sub>	SO <sub>x</sub>	PM <sub>10</sub>
2w	Hwy	8443 – 26350	3335 – 10410	33 – 102	3 – 9	75 – 236
	Art	11504 – 35904	3950 – 12327	95 – 296	2 – 6	95 – 297
	Res	1595 – 4979	556 – 1735	14 – 43	0 – 1	13 – 41
	<i>Total</i>	<i>21542 – 67234</i>	<i>7841 – 24473</i>	<i>141 – 441</i>	<i>5 – 16</i>	<i>184 – 574</i>
Taxi	Total*	4470 – 13951	144 – 449	249 – 776	1 – 4	6 – 18
Bus	Total*	755 – 2357	177 – 553	2371 – 7399	1 – 4	362 – 1131
Truck	Total*	727 – 2269	144 – 450	1107 – 3455	1 – 1	192 – 598
Total		43396 – 135442	9646 – 30107	4890 – 15263	26 – 81	765 – 2387

\*Analysis by road type was not considered for these vehicle categories.

In order to spatially disaggregate the on-road vehicular EI of Manizales, a domain of 17 km x 14 km covering the urban zone was established and gridded with a spatial resolution of 1km x 1km. The resolution was chosen based on similar studies (Clarke and Ko, 1996; Costa and Baldasano, 1996; Loibl et al., 1993; Tuia et al., 2007), and is high enough to spatially find air pollution hotspots (Parra et al., 2006). Furthermore, these gridded emissions could be used for air quality modelling purposes (Ossés de Eicker et al., 2008). Figure 1 shows the study area domain and its gridded configuration, including the road network of the city and traffic count points, which were used in the application of top-down methods.

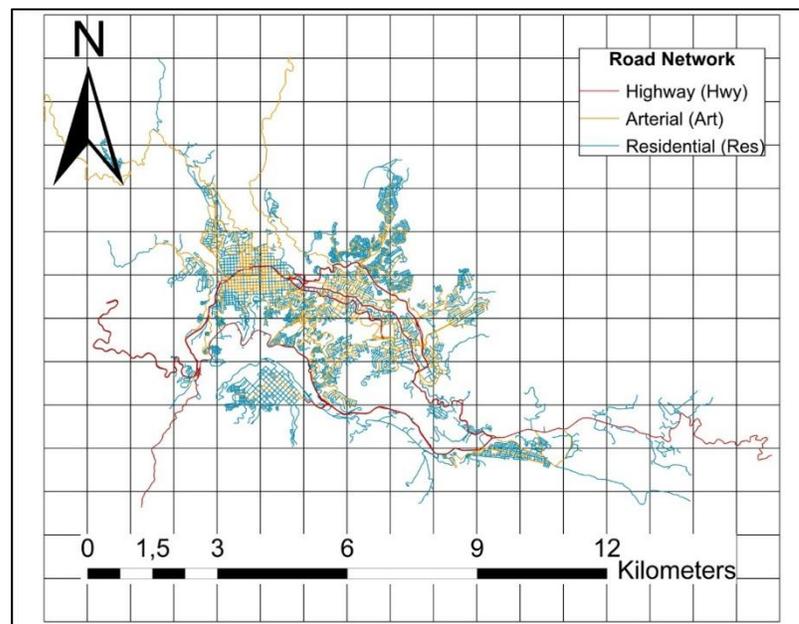


Figure 1. Study area for disaggregating the on-road vehicular EI in Manizales. Grid cells are shown with a resolution of 1km x 1km.

## 2.2. Disaggregation methodology

Different top-down approaches were used to compare the results. The more complex method, called *Traffic Counts Classification* (TCC), was chosen as the reference method to disaggregate the on-road EI in Manizales. Other simplified methods, which use less and coarse information, were

compare against the reference method. Table 2 summarizes the main parameters of all methods analyzed in the study. Simplified methods were divided in two groups based on total traffic counts and road density. In the group of total traffic counts category, a first method denoted as *Total Traffic Counts Classification* (TTCC), considered levels of traffic flow (high, medium and low traffic) and the other, denoted as *Total Traffic Counts* (TTC), considered only the total counts. In the group of road density categories, a first method, denoted as *Complete Road Network* (CRN), used the complete road network with the three types of roads (Fig. 1). The other, denoted as *Simplified Road Network* (SRN), uses a simplified road network which avoid residential road segments (Ossés de Eicker et al., 2008; Saide et al., 2009; Tuia et al., 2007). All methods evaluated in this study are explained in detail in the sections below.

**Table 2. Summary of methods used in the spatial disaggregation of the on-road vehicle EI in Manizales.**

Parameters	Reference Method	Simplified Methods			
	Traffic Counts Classification (TCC) (Peñaloza, 2010; Saide et al., 2009)	Total Traffic Counts		Road Density	
		Total Traffic Counts Classification (TTCC) (Saide et al., 2009)	Total Traffic Counts (TTC) (Saide et al., 2009)	Complete Road Network (CRN) (Saide et al., 2009)	Simplified Road Network (SRN) (Ossés de Eicker et al., 2008; Saide et al., 2009; Tuia et al., 2007)
<b>Vehicle categories</b>	PC 2w Taxi Bus Truck	NO	NO	NO	NO
<b>Types of road (Only for PC and 2w)</b>	Hwy Art Res	NO	NO	NO	NO
<b>Traffic counts</b>	Classified into levels of traffic: high, medium, and low. Applied to each vehicle category and road level	Classified into levels of traffic: high, medium, and low, but applied to total traffic counts <sup>a</sup> .	Total traffic counts <sup>a</sup> .	NO	NO
<b>Length of the segments</b>	All segments	All segments	All segments	All segments	Without Residential level segments
<b>Disaggregation factors per cell</b>	9 <sup>b</sup>	1	1	1	1

<sup>a</sup>Total traffic counts: obtained by adding the counts of all vehicle categories.

<sup>b</sup>Disaggregation factors calculated per hour.

### 2.3. Reference method: Traffic counts classification (TCC)

The lack of a traffic model could be supplied using information of traffic counts and classifying the roads into levels of traffic flow, e.g. high, medium, and low. This is a valuable tool when traffic counts are not periodically updated, maintaining the validity of the data for future studies and avoiding the use of arbitrary classification or assignment of weighting factors to the roads, associated with its type or another characteristic. This is the base of Traffic Counts Classification (TCC) method, which includes also road segments (highway, arterial and residential) and its classification into levels of traffic flow. Saide et al. (2009) found this method to have the best correlation factor

compared with the bottom-up emission inventory in the city of Santiago, Chile, reaching good levels of accuracy and simplicity. Additionally, in Manizales this method helped to smooth the traffic data which is extrapolated to other regions without information, avoiding that traffic in zones characterized by high traffic conditions, was extrapolated to other areas characterized by low vehicular activity such as residential zones in the peripheral region. Figure A.1 of supplementary material shows the relative difference in disaggregation factors using direct traffic counts result, in areas of overestimation and underestimation (shown in red and blue) – demonstrating the importance of using traffic count classification. It is possible to note that the use of traffic counts directly tend to overestimate disaggregation factors mainly in the north and east of the city. Traffic information of these areas was limited, however, they were characterized by the presence of residential roads and low vehicular activity. Hence, TCC method was defined as the reference method considering the information availability such as hourly traffic data, distributed information about traffic counts and a detailed road network in Manizales; being possible to classify the road segments into levels of traffic. In the present study, the method applied by Saide (2009) was complemented with a classification of the segments per vehicle category, road type and hour. A similar method was applied by Peñaloza (2010) for the spatial and temporal disaggregation of the on-road vehicle EI in Bogotá, Colombia.

In this study, TCC method was applied to each vehicle category (PC, 2w, Taxi, Bus, and Truck). According to the analysis by sector developed in the total emissions inventory for passenger cars and motorcycles, categories with the highest participation (up to 90%) of the automotive park (González et al., 2017), the analysis was also performed in terms of the type of road (Highway, Arterial, and Residential). The road network used in this study (Fig. 1) corresponds to a map updated to 2015 from the built for the urban mobility plan of the city (Escobar and Garcia, 2012). This map contains information of around 10500 road segments in terms of length, type of road, slope, road capacity and public transport routes. Table 3 summarizes the information of road segments in Manizales for the three types of roads analyzed in the study.

**Table 3. Summary of Manizales road network characteristics and its segment information.**

Type of road	Road segments length, km	Segments per type of road
Highway	89.5	936
Arterial	175.3	3056
Residential	385.1	6586
Total	649.8	10578

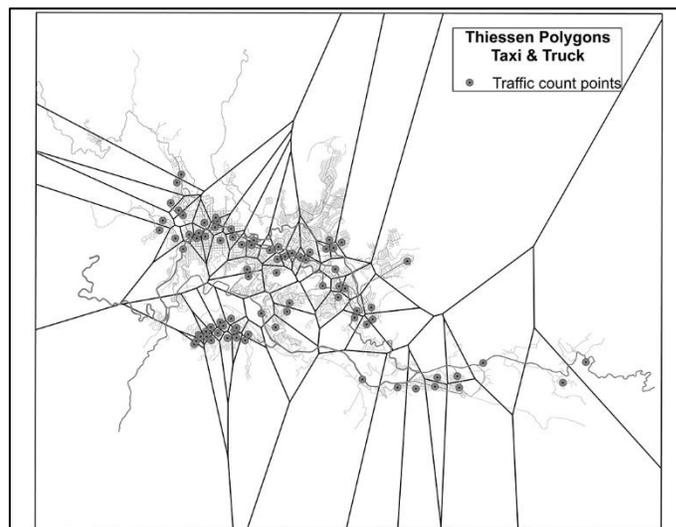
Information about traffic counts was obtained from two sources: 1) Traffic counts obtained during the driving pattern campaigns of IVE methodology performed in the estimation of total EI (González et al., 2017). 2) Traffic counts data from an environmental noise level study performed by the local environmental agency (CORPOCALDAS) in the metropolitan area of Manizales during 2014 (CORPOCALDAS 2014; 2015). The traffic counts were taken on weekdays covering 24 hours in approximately 80 points. Figure 2 shows the spatial distribution of the traffic count points used for the spatial disaggregation of EI in the medium-sized city of Manizales. Table 4 summarizes the information of traffic counts available for every vehicle category and road type.

**Table 4. Summary of traffic count points taken in Manizales.**

Vehicle category	Road type	Number of traffic counts
PC	Hwy	20
	Art	36
	Res	25

Vehicle category	Road type	Number of traffic counts
	<i>Total</i>	81
	Hwy	20
2w	Art	36
	Res	25
	<i>Total</i>	81
Taxi	<i>Total</i>	81
Bus	<i>Total</i>	67
Truck	<i>Total</i>	81

Thiessen polygons were applied to distribute the traffic counts to those road segments without information. This is an interpolation method in which the polygons are created by joining the points together, tracing the bisectors of the segments union. The intersections of these bisectors determine several polygons in a two-dimensional space around a set of control points, hence, the perimeter of polygons generated is equidistant to neighboring points and designate their area of influence (Voronoi, 1907). This geometric method is used to calculate weighting factors from the polygon areas (Mu, 2009). The segments in the area covered by the polygon were assumed to have the same traffic counts of the point that generates the polygon. For every vehicle category and type of road, an independent set of Thiessen polygons were traced, as shown in Figure A.2 of supplementary material. Figure 2 shows an example of the Thiessen polygons traced for taxis and trucks, using all the traffic counts points in the study area. This procedure was used by Peñaloza (2010) to disaggregate in time and space the EI in the megacity of Bogotá, the capital of Colombia and one of the most populated cities of Latin America.



**Figure 2. Thiessen polygons traced from traffic count points in Manizales for taxis and trucks.**

The traffic flow of each segment of road was classified into three levels of traffic: high, medium, and low. The Jenks natural breaks optimization method was applied for this purpose. This is a data clustering method designed to determine the best arrangement of values in different classes; which are defined as intervals of the data analyzed. The method aims to reduce the variance of the data of each class by increasing the variance between classes (Jenks, 1963). The average value of the data within the defined range was calculated for each class. The classification factor is the average value

of each class, normalized by the average value of the class "low". This value is rounded to the nearest integer (Saide et al., 2009). Table 5 contains an example of the intervals and classification factors calculated to define traffic flow levels for passenger cars in the three road types at midday (12h). Complete information obtained for all vehicular categories is shown in Table A.1 of supplementary material.

**Table 5. Traffic flow levels for passenger cars at 12h and the intervals define by Jenks natural breaks optimization method for reference TCC method.**

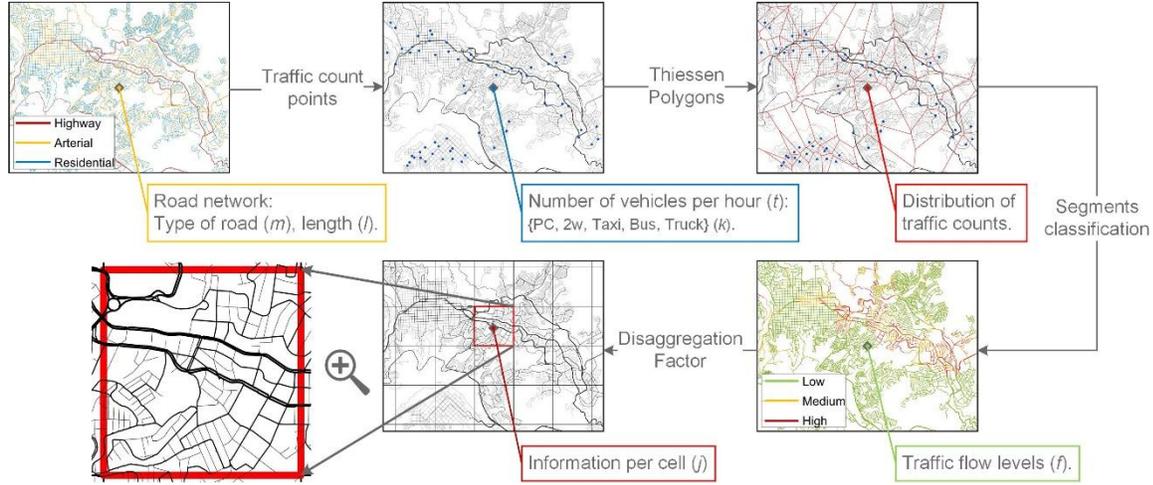
Vehicle category	Traffic flow level	Traffic flow intervals, veh/h			Classification factor, $f$
		Lower	Upper	Mean	
PCHwy	Low	82	1023	614	1
	Medium	1023	1870	1557	3
	High	1870	4768	4768	8
PCArt	Low	30	359	193	1
	Medium	359	693	574	3
	High	693	1097	1083	5
PCRes	Low	13	75	45	1
	Medium	75	172	136	3
	High	172	239	227	5

Finally, the top-down approaches consist in find weighting factors for each cell in the domain. These factors are normalized and represent the percentage of the emission in every cell (Tuia et al., 2007). The weighting factors are also called disaggregation factors (DFs), these are used to spatially allocate the total emissions. In this study, the total emission inventory was estimated in a previous work (Gonzalez et al., 2017). Equations 1 and 2 were used to calculate the DFs for the reference TCC method. Equation 1 was used to calculate the DF of passenger cars and motorcycles obtained for each type of road (Hwy, Art, and Res), while Equation 2 was used to calculate the DF of bus, taxi, and truck categories independent of the type of road. Figure 3 graphically describes where the information for the Eq. 1 is taken in an example cell. Similar information is used in Eq. 2.

$$DF_{j,k,m,t} = \frac{\sum_0^i f_{i,j,k,m,t} * l_{i,j,m}}{\sum_0^j \sum_0^i f_{i,j,k,m,t} * l_{i,j,m}} \quad (1)$$

$$DF_{j,k,t} = \frac{\sum_0^i f_{i,j,k,t} * l_{i,j}}{\sum_0^j \sum_0^i f_{i,j,k,t} * l_{i,j}} \quad (2)$$

In equations (1) and (2)  $DF_{j,k,m,t}$  is the disaggregation factor for the vehicle category  $k$ , in the cell  $j$  for each time interval  $t$  on the type of road  $m$  (only for PC and 2w). Also,  $f$  is the traffic flow classification factor for the segment  $i$  in the time  $t$ , and  $l$  the length of the segments.



**Figure 3. Step by step to apply TCC method for getting information from each cell.**

The total emission per cell ( $E$ ) is calculated by summarizing the emissions of every vehicle category and type of road for passenger cars and motorcycles (Eq. 3) and then summarizing the emissions of these categories and the remaining vehicle categories (bus, taxi, and truck) (Eq. 4).

$$E_{n,j,k,m,t} = \sum_1^m (TE_{n,k,m,t} * DF_{j,k,m,t}) \quad (3)$$

$$E_{n,j,t} = \sum_1^k (TE_{n,k,t} * DF_{j,k,t}) + E_{n,j,t,PC} + E_{n,j,t,2w} \quad (4)$$

In equations (3) and (4)  $E_{n,j,k,m,t}$  and  $E_{n,j,t}$  is the total emission of the pollutant  $n$  in the cell  $j$  for the vehicular category  $k$  in the time  $t$  associated with road type  $m$  (in the case of PC and 2w). The temporal disaggregation was performed classifying the road segments in high, medium, and low traffic levels applying the Jenks natural breaks optimization, but using an hourly basis with the information of allocated traffic count points. The disaggregation factors are calculated hourly for each vehicle category. In the study of González et al. (2017), the overall vehicle fleet distribution was obtained in Manizales for each vehicle category ( $k$ ) during a typical working day (Fig. A.3 of supplementary material). In that sense, a total emission ( $TE$ ) per hour ( $t$ ) in the entire domain can be calculated using this distribution. These data allows the spatial and temporal distribution of emissions by multiplying the total hourly emissions ( $TE$ ) with the hourly disaggregation factors ( $DF$ ) as is described by equations (3) and (4).

#### 2.4. Simplified methods

In majority of medium-sized cities, specifically those in emerging countries, information about traffic counts per vehicle category and a detailed road network map is not always available and easy to obtain. Trying to reduce the quantity of information necessary to apply the traffic counts classification method (TCC) described above, simplified top-down methods were evaluated and compared with the reference method. For all the methods described below, the emission per cell,  $E_{n,j}$ , is calculated as follows:

$$E_{n,j} = TE_n * DF_j \quad (5)$$

Where  $TE_n$  is the total annual emission of the pollutant  $n$  obtained from Table 1 and  $DF_j$  is the disaggregation factor for the cell  $j$ .

### 2.4.1. Methods based on Total Traffic Counts (TTC, TTCC)

In order to simplify the reference method by reducing the input information, two methods were evaluated in which total traffic counts are used. The total traffic counts were calculated by adding the traffic counts of each vehicle category per point. The first method, denoted as total traffic counts classification (TTCC), is similar to the reference method (TCC). However, the total traffic counts are classified into levels for all vehicular fleet without differentiation of road type, aggregating the traffic counts of all the vehicle categories in a day as it is shown in Table 6. Thiessen polygons were obtained in an analogous way to that described in section 2.3. The disaggregation factor was calculated applying Eq. 6.

$$DF_j = \frac{\sum_0^i f_{i,j} * l_{i,j}}{\sum_0^j \sum_0^i f_{i,j} * l_{i,j}} \quad (6)$$

Table 6. Traffic counts classification for TTCC method.

Traffic flow level	Traffic flow intervals (veh/day)			Classification factor (f)
	Lower	Upper	Mean	
Low	640	14553	5314	1
Medium	14553	36436	26675	5
High	36436	77466	46563	9

The second method in this group, denoted as total traffic counts (TTC), avoid the classification of the segments into levels of traffic. The number of vehicles is assigned to the segments using the same Thiessen polygons obtained for TTCC simplifying this method (Fig. A.1 of supplementary material). The disaggregation factor was calculated applying Eq. 7.

$$DF_j = \frac{\sum_0^i F_{i,j} * l_{i,j}}{\sum_0^j \sum_0^i F_{i,j} * l_{i,j}} \quad (7)$$

Where  $F$  is the total traffic flow for the segment  $i$  in the cell  $j$ .

### 2.4.2. Methods based on Road Density (CRN, SRN)

Road density methods are the simplest forms of spatial disaggregation. Only the length of the segments in the road network is used (Ossés de Eicker et al., 2008; Tuia et al., 2007). This method is useful when information about traffic flow is not available or representative. This method has been linked to underestimation of emissions in downtown and areas characterized by higher traffic flows, and overestimation of the emissions in industrial areas of medium-sized cities (Ossés de Eicker et al., 2008; Tuia et al., 2007). However, considering that acquiring representative traffic flow information is hard and one of the most common deficiencies in majority of cities, this study aims to analyze the level of inaccuracy of this method compared with reference TCC, which uses traffic flow inputs. Two different approaches were applied in Manizales. In the first one, a complete road network (CRN) was used, the same as in the methods above but without including traffic flow information. In the second one (denoted as SRN), the road network was simplified by removing the segments classified as residential (Res). The simplification of the road network may reduce the error in the spatial disaggregation. Residential roads correspond to the 62% of the road network length but only the 10% of vehicular traffic passes through there. The disaggregation factor was calculated applying Eq. 8.

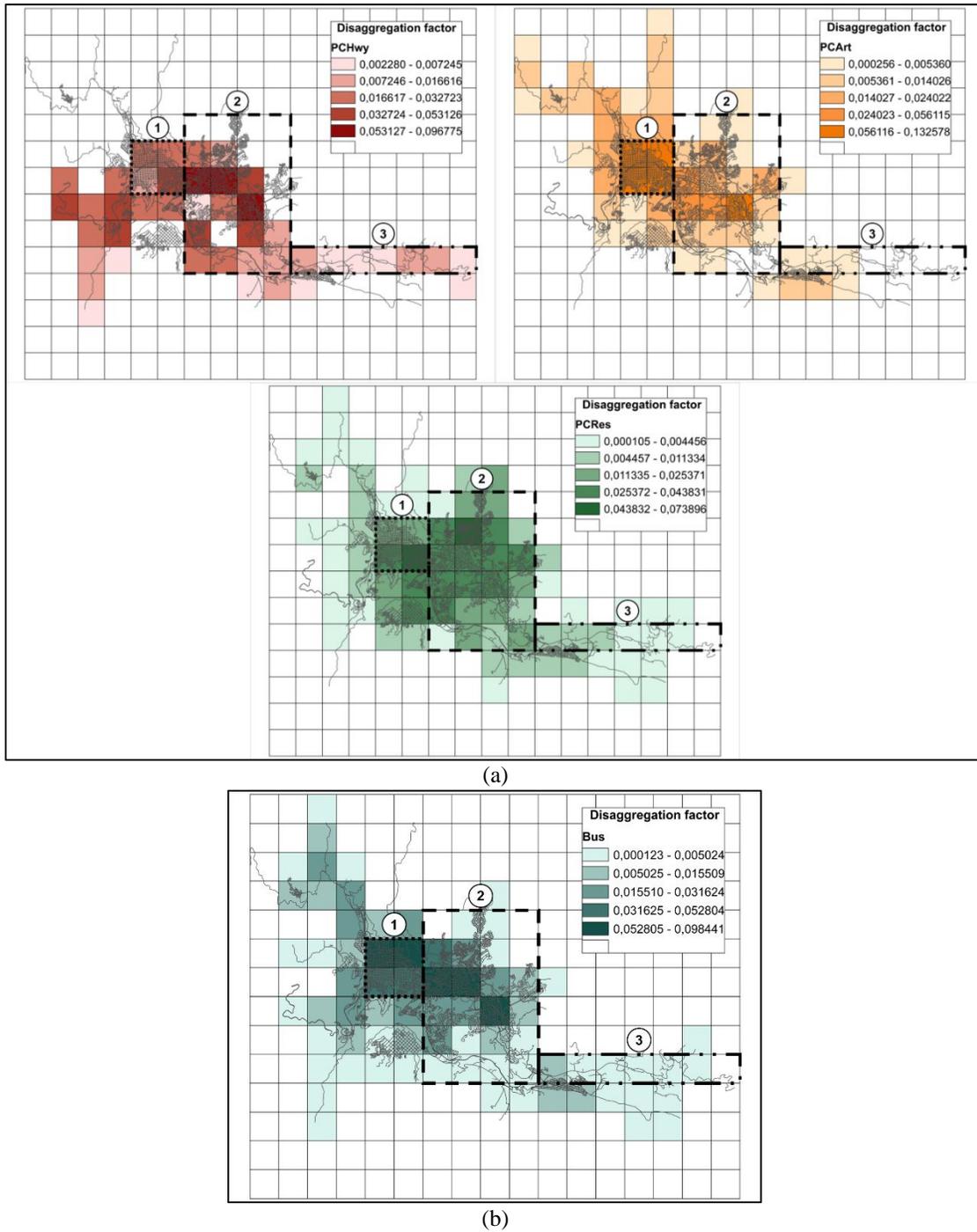
$$DF_j = \frac{\sum_0^i l_{i,j}}{\sum_0^j \sum_0^i l_{i,j}} \quad (8)$$

### 3. Results and discussion

#### 3.1 Disaggregation factors

In the application of TCC method, nine Disaggregation factors (DF) were obtained per hour, one for each vehicular category (bus, taxi, and truck) and three DFs per type of road in the case of passenger cars (PC) and motorcycles (2w). These DFs allowed the visualization of different weighting hotspots, especially in downtown and residential-commercial areas of the city. The DFs obtained hourly for PC (on the three types of roads studied: Hwy, Art, and Res) and buses are shown in Figure 4a and 4b, respectively. The disaggregation factor maps of each vehicle categories for the reference TCC and simplified methods can be found in Figure A.4 and Figure A.5 of supplementary material, respectively. Three zones were defined for the analysis of DFs and its disaggregation maps, considering its differences in terms of traffic activity and socio-economic behavior: 1) downtown, 2) residential-commercial area and 3) industrial zone. The highest value of all DFs calculated in Manizales ( $0.132/\text{km}^2$ ) was obtained in the arterial roads of downtown area and was associated with the use of PC category. This result can be clearly visualized in Figure 4a, where hotspots of PC on arterial roads (PCArt) are observed mainly at downtown area in comparison with other zones of the city, suggesting a pressure in the emission of pollutants such as CO and NMVOC from the use of PC (predominant pollutants of this vehicle category, see Table 1). DFs obtained in highway roads were also important for PC, with higher values ranged from  $0.072/\text{km}^2$  to  $0.097/\text{km}^2$  in the residential-commercial zone (PCHwy in Fig. 4a). In terms of 2w vehicles, which reported the highest releases of CO and NMVOC among all vehicular categories evaluated in the EI (Table 5), higher DFs were obtained in the arterial roads of downtown area denoted as zone 1 in Fig. 4, similar behavior to that obtained for PC, with a maximum value of  $0.110/\text{km}^2$ . Despite downtown area was characterized by higher DF values for motorcycles, there were also cells in residential-commercial area with considerable DF values of  $0.090/\text{km}^2$  (Hwy road) and  $0.072/\text{km}^2$  (Res road), suggesting that motorcycles could contribute too with significant emissions inside this important area of the city.

Buses were characterized by higher DFs in the residential-commercial area with a maximum value of  $0.098/\text{km}^2$  in a cell dominated by Hwy roads (Fig. 4b). This category was responsible of the high percentage of total  $\text{PM}_{10}$  releases in Manizales (47%). Furthermore, a second DF hotspot for buses was obtained in the downtown area with a value of  $0.066/\text{km}^2$ . On the other hand, higher values of DFs in the industrial area were obtained for trucks ( $0.023/\text{km}^2$ ); however, these values were low compared with maximum DFs described above for downtown and residential-commercial areas. This result suggests that the influence of vehicular emissions in air pollution east of the city (predominantly an industrial zone) is relatively low, despite the major transit of truck vehicles, whose traffic counts were higher in the industrial area (around 1500 vehicles/day). Hence, Manizales is characterized by a low presence of truck emissions, with respect to other categories such as PC, 2w (principal sources of CO and NMVOC), and public transport – buses (responsible of majority of  $\text{PM}_{10}$  and  $\text{NO}_x$  releases in the city).



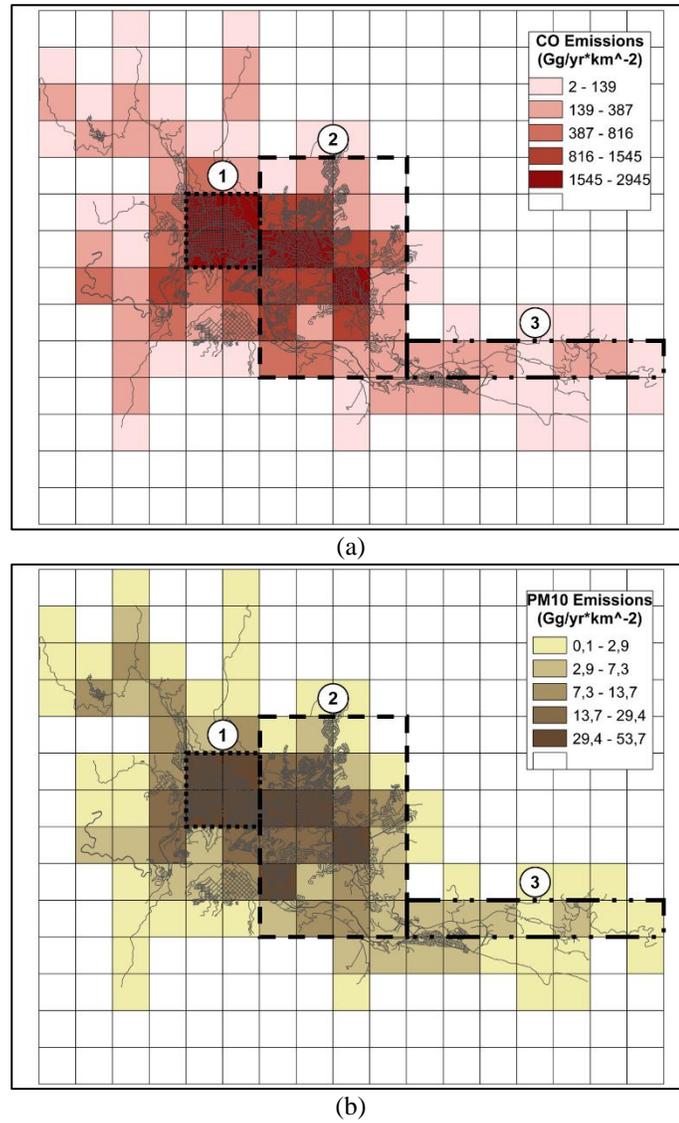
**Figure 4. Disaggregation factors obtained in Manizales using the traffic counts classification method (TCC) for a) passenger cars (PC) in the three types of roads: highway (Hwy), arterial (Art) and residential (Res); and b) Buses. Zones of analysis were defined as: 1) Downtown. 2) Residential-commercial area. 3) Industrial area.**

**3.2. Hotspots of total CO and PM<sub>10</sub> emissions spatially disaggregated with the reference method**

Hotspots of total emissions (Gg/yr\*km<sup>-2</sup>) were found in downtown (zone 1 in Fig. 5) and the residential-commercial area of Manizales (covered mainly in the analysis zone 2 in Fig. 5). The use

of CO and PM<sub>10</sub> as the reference pollutants for comparing hotspots of the disaggregated EI was supported considering two aspects: first, the analysis of hotspots could be expanded for all the pollutants in the emission inventory with minor differences among pollutants. This affirmation was suggested by Ossés de Eicker (2008) and Saide et al. (2009), which shown that small differences in accuracy are obtained when comparing hotspots for different pollutants in medium-sized cities, obtained from the use of a disaggregation methodology based on top-down approaches and the estimation of disaggregation factors (e.g. the reference TCC method). Second, the importance of CO and PM<sub>10</sub> emissions in Manizales, where higher releases were obtained for CO (43396 Gg/yr) - mainly associated to the use of PC and 2w. In the case of PM<sub>10</sub>, this is one of the most important pollutants studied and measured in the air quality network (AQN) of the city and majority of AQN around the world. Public transport (buses), category that uses only specific routes in the road network of the city, was responsible of 362 Gg/yr of PM<sub>10</sub> releases comprising 47% of total PM<sub>10</sub> emissions, despite its low percentage in vehicular fleet (2%). Hence, differences in hotspot emissions could be obtained for PM<sub>10</sub> in comparison with other pollutants such as CO. The application of TCC method allowed the estimation of disaggregation factors for every vehicle category and type of road. This result allows the representation of emission maps for all pollutants in the EI, which are shown in the Figure A.6 of supplementary material.

Both CO and PM<sub>10</sub>, showed its highest emissions in the residential and commercial areas of the city (zone 2 of Fig. 5) with 46% (20124 Gg/yr) and 47% (356 Gg/yr) of total emissions of CO and PM<sub>10</sub> respectively. The industrial zone (denoted as zone 3 in Fig. 5), was characterized by lower emissions of CO (1194 Gg/yr) and PM<sub>10</sub> (27 Gg/yr) comprising only 3% of total emissions of both pollutants in the city. The predominance of heavy duty trucks characterizes the industrial area. These results suggest that there is a higher presence of public transport (buses), motorcycles (2w) and passenger cars (PC) in the emissions of atmospheric pollutants in residential and commercial area of Manizales, against those obtained in the industrial zone, dominated by circulation of heavy duty trucks, but with low contribution of pollution when comparing the principal socioeconomic areas in Manizales. On the other hand, downtown Manizales emitted 23% of CO (10025 Gg/yr) and 21% of PM<sub>10</sub> (159 Gg/yr) emissions, important result considering that this is a small area compared with the residential-commercial zone. When a percentage contribution of emissions is analyzed (proportion of total emissions at each zone defined previously, normalized by its total area in km<sup>2</sup>), downtown Manizales emitted 6% and 5% of total CO and PM<sub>10</sub> emissions per km<sup>2</sup> respectively; higher indexes than those obtained in residential-commercial area with 2% of emissions of both pollutants per km<sup>2</sup>. High traffic at downtown is influenced mainly by transit of PC, 2w and buses, producing an important hotspot of pollution, which should be subject of analysis of policy decision makers.



**Figure 5. Top-down emission inventory map in Manizales using traffic counts classification method for (a) CO and (b) PM<sub>10</sub>. Grid cell of 1km x 1km. 1) Downtown. 2) Residential-commercial area. 3) Industrial area.**

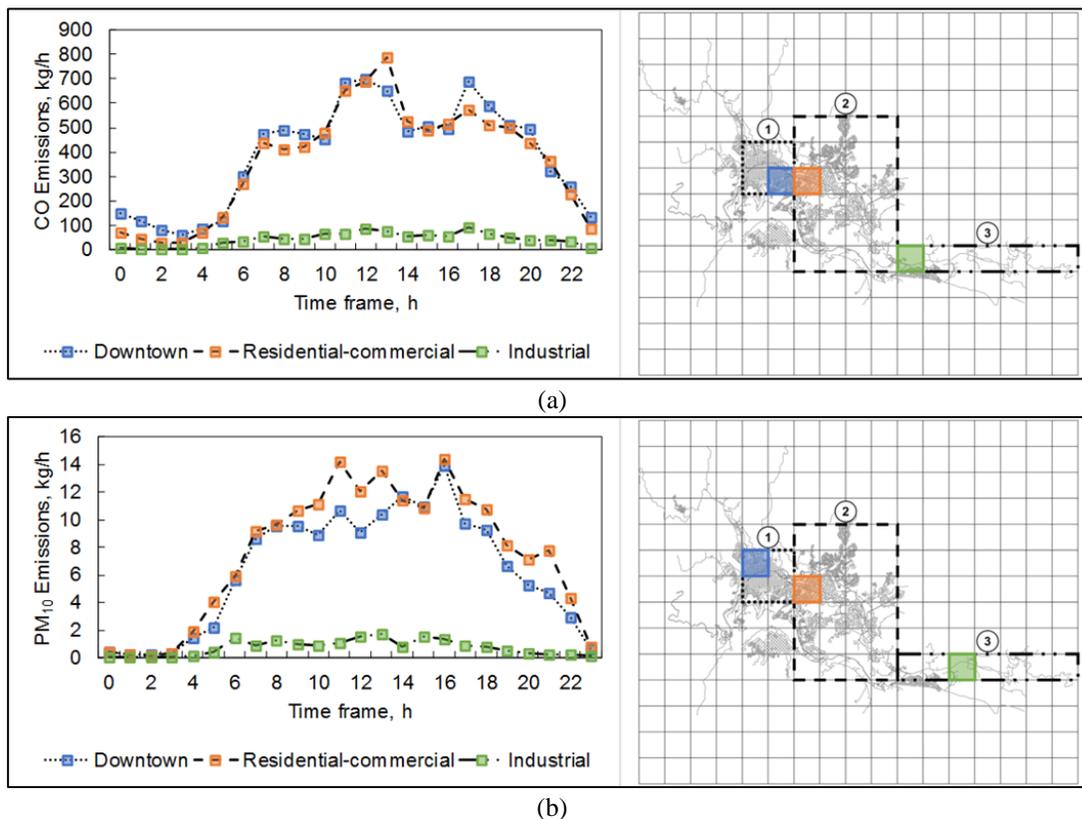
### ***3.3. Temporal distribution of emissions using reference method***

Two common peaks of CO emissions were obtained for the three zones of analysis during midday (12h to 13h) and the end of the afternoon (17h). In the case of PM<sub>10</sub> emissions, there was an important emission peak around 16h, but other peaks were obtained during the day especially in the residential-commercial area. These results are shown in Figure 6, which contains the hourly distribution of CO (Fig. 6a) and PM<sub>10</sub> (Fig. 6b) emissions, during a typical working day. The results were shown in those cells with higher hotspots of emissions obtained at each zone of analysis (colored squares in Fig. 6). These cells were characterized by daily CO emissions per cell of 9332 kg/day in downtown (7% of total), 8770 kg/day in residential-commercial zone (6% of total), and 1042 kg/day in industrial zone (1% of total). On the other hand, hotspots chosen for PM<sub>10</sub> were characterized by daily emissions of 153 kg/day in downtown (6% of total), 181 kg/day in residential-commercial zone (8% of total), and 18 kg/day in the industrial area (1% of total).

Differences in temporal distribution obtained for both pollutants suggest the influence of vehicle categories and traffic patterns. CO emission distribution was dominated by PC and 2w traffic patterns, which enhance a first peak of traffic during midday rush hour. This peak was characterized by higher fluxes in residential-commercial zone (786 kg/h) followed by those found in downtown area (699 kg/h). Similar emission peak than that obtained at 12h-13h were found at 17h with 574 kg/h of CO in residential-commercial zone and 687 kg/h of CO in downtown. Despite the emissions during beginning of the day where low, in comparison with the two main peaks described for CO, an exponential growth in CO emissions was found from 3h to 7h. An important emission flux was obtained at 7h, with values of 436 kg/h and 473 kg/h in residential-commercial and downtown area respectively.

On the other hand, the hourly distribution of PM<sub>10</sub> emissions suggests the influence of public transport, a vehicle category dominated by a relatively constant traffic distribution during working days. This pattern was supported by the emission peaks found for PM<sub>10</sub> fluxes, with relatively higher values found in residential-commercial zone around 11h (14.2 kg/h), 13h (13.6 kg/h) and 16h (14.3 kg/h). Downtown exhibited lower fluxes with maximum peaks around 11h (10.6 kg/h), 14h (11.6 kg/h), and 16h (13.9 kg/h). A similar exponential growth than that found for CO emissions was found for PM<sub>10</sub> from 3h to 7h (6h for industrial zone). Its highest morning PM<sub>10</sub> peak was reached at 7h with fluxes of 9.2 kg/h and 8.6 kg/h for residential-commercial and downtown zone respectively.

The influence of PC and 2w in emissions of CO in downtown and residential-commercial area, and the impact of public transport in PM<sub>10</sub> emissions in the residential-commercial zone was supported by the high presence of these vehicle categories.



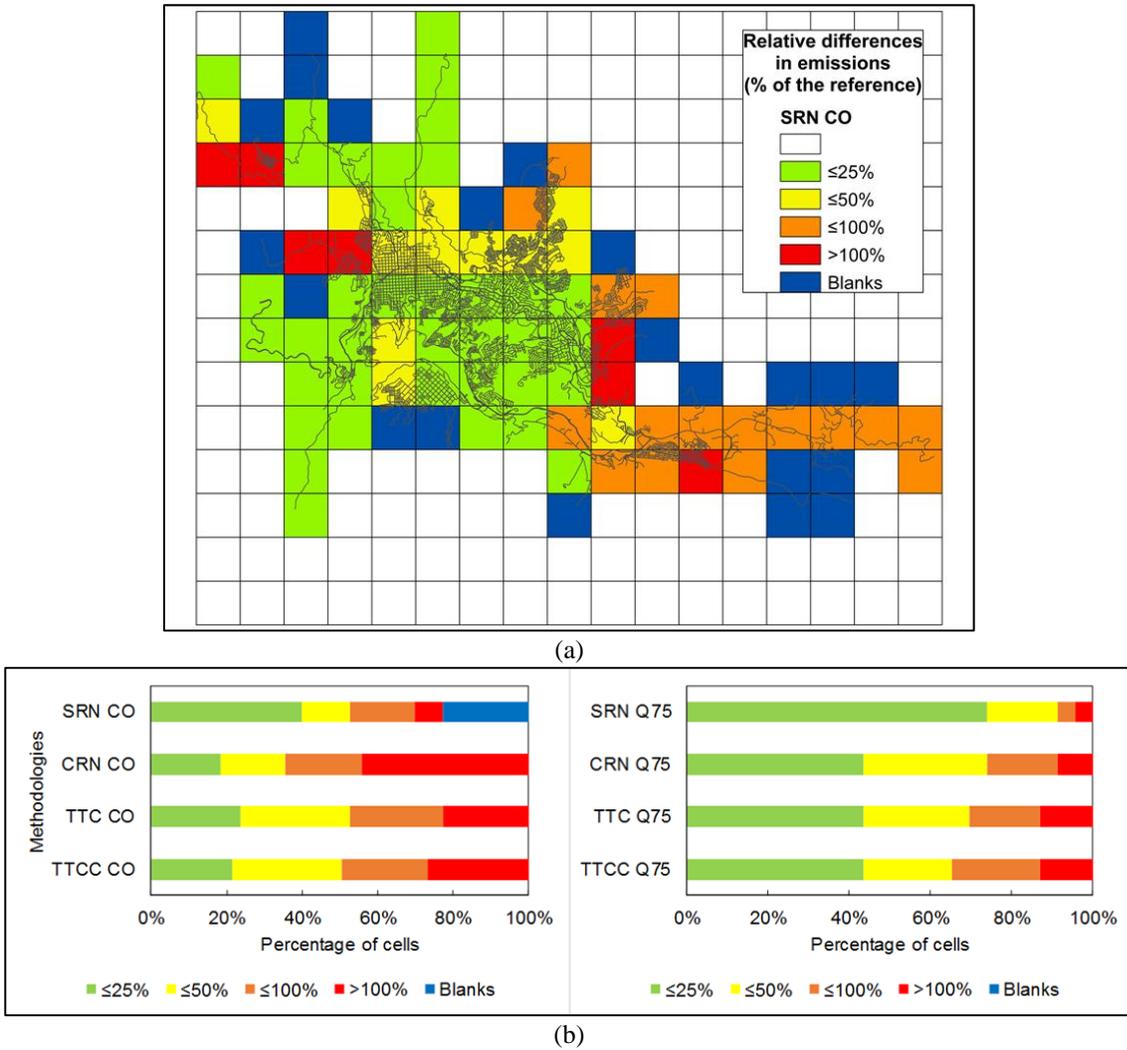
**Figure 6. Temporal distribution of a) CO and b) PM<sub>10</sub> emissions in cells with the maximum emissions in a typically working day, for each of zones of analysis: 1) Downtown. 2) Residential-commercial area. 3) Industrial area.**

### ***3.4. Relative and absolute differences in the spatial disaggregation between reference (TCC) and simplified methods***

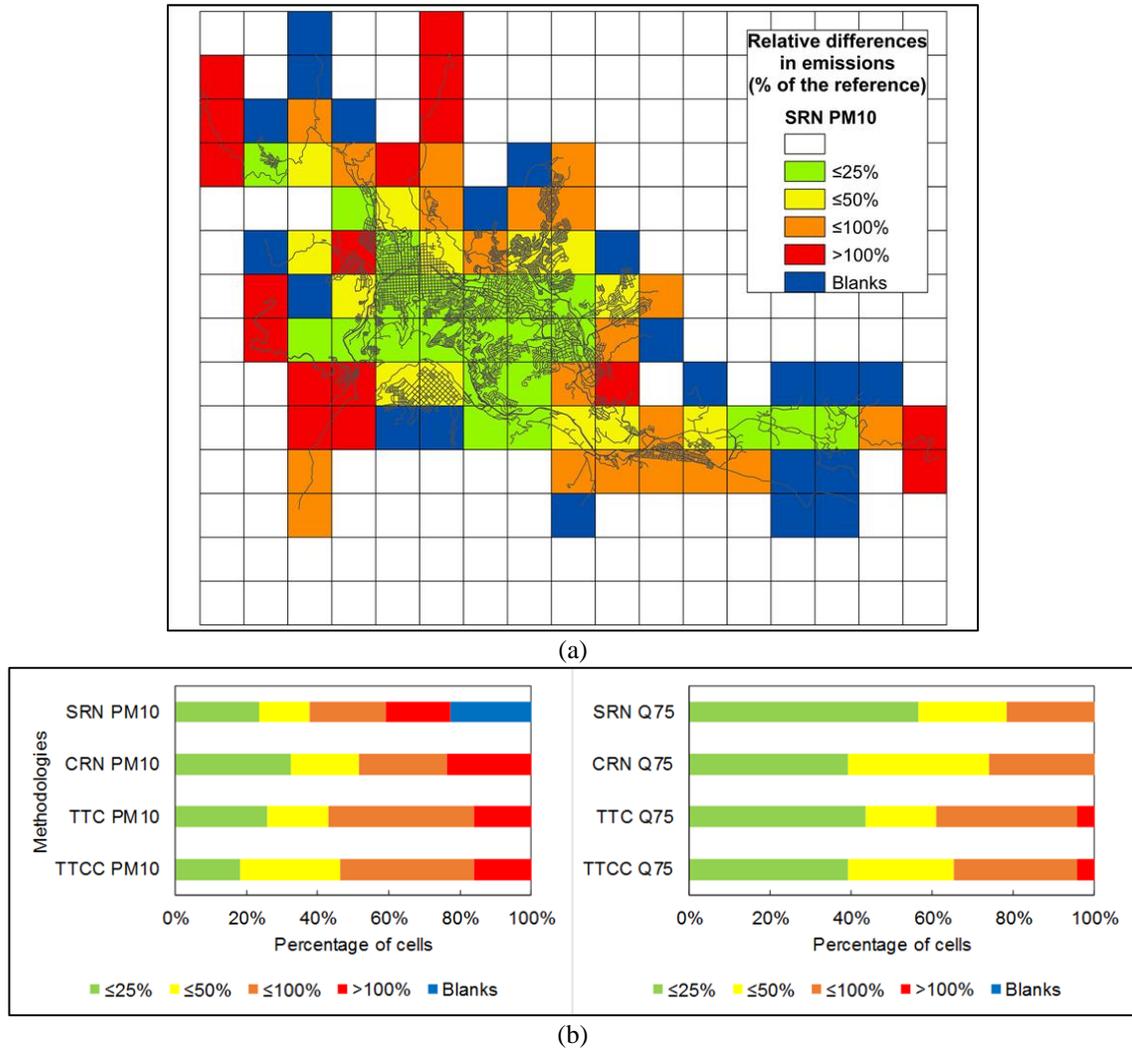
Relative differences in CO and PM<sub>10</sub> emissions higher than 50% were obtained in peripheral areas of the city when comparing the simplified top-down technics against the reference TCC method (Figure A.7 of supplementary material.). On the other hand, zones around the geographic center characterized by high vehicular traffic such as downtown and residential-commercial area of Manizales, showed majority of grid cells with differences lower than 25% for both pollutants, suggesting a similar representation than that obtained from the use of TCC method. This result suggests that simplified methods could represent hotspots of emissions in zones dominated by higher density of roads and higher levels of traffic, but they tend to under or overestimate emissions on peripheral areas of the city. A possible explanation of this result is the fact that over these surrounding areas, the traffic activity is not well reflected by the road density distribution, while in downtown and nearby residential-commercial areas, high traffic density cells are directly related with high levels of traffic.

Road density methods (SRN, CRN) presented the highest percentage of cells with relative differences in CO and PM<sub>10</sub> emissions greater than 100% mainly in the industrial zone of the city at east (30% and 41% of cells for CO and PM<sub>10</sub> emissions respectively) and some peripheral areas (44% and 24% of cells for CO and PM<sub>10</sub> emissions respectively) (Fig. 7 and 8). In the case of SRN method, cells with only residential roads do not have a disaggregation factor, thus no information of emissions (cells in blue in Fig. 7a and 8a denominated as blanks) were obtained. This factor could increase the uncertainties of this simplified technique. However, these differences were found in the zones with the lowest emissions fluxes of the EI. When this analysis is performed in regions characterized by high emission zones (defined as those cells with emission values over quantile 75), the SRN method shown the highest percentage of cells with lower differences from reference method for both pollutants (right sides of Fig. 7b and 8b), with 74% and 57% of cells with relative differences <25% in emissions of CO and PM<sub>10</sub> respectively. These percentages were higher than those obtained for the other three simplified methods, which reported approximately 40% of cells with relative differences <25% in emissions of CO and PM<sub>10</sub>. This fact suggests that when only road density simplified technics can be applied, more approximated and reliable results could be obtained in those regions dominated by higher density of roads such as downtown and residential-commercial areas, specially those zones with predominance of Hwy and Art roads.

A narrow acceptability criterion of 30% of relative difference was defined in other studies around the world to choose the best disaggregation method based on the comparison with a reference method (Ossés de Eicker et al., 2008; Winiwarter et al., 2003). The method with higher percentage of cells that fulfilled this narrow acceptability criterion was SRN, with more than 50% of cells in this range (Fig. 7b and 8b).



**Figure 7. Relative difference for CO emissions between reference method and simplified methods for the spatial disaggregation of the EI in Manizales. a) Relative difference map against SRN method. b) Percentage of cells that fulfill the breaks of relative difference for all the simplified methods.**

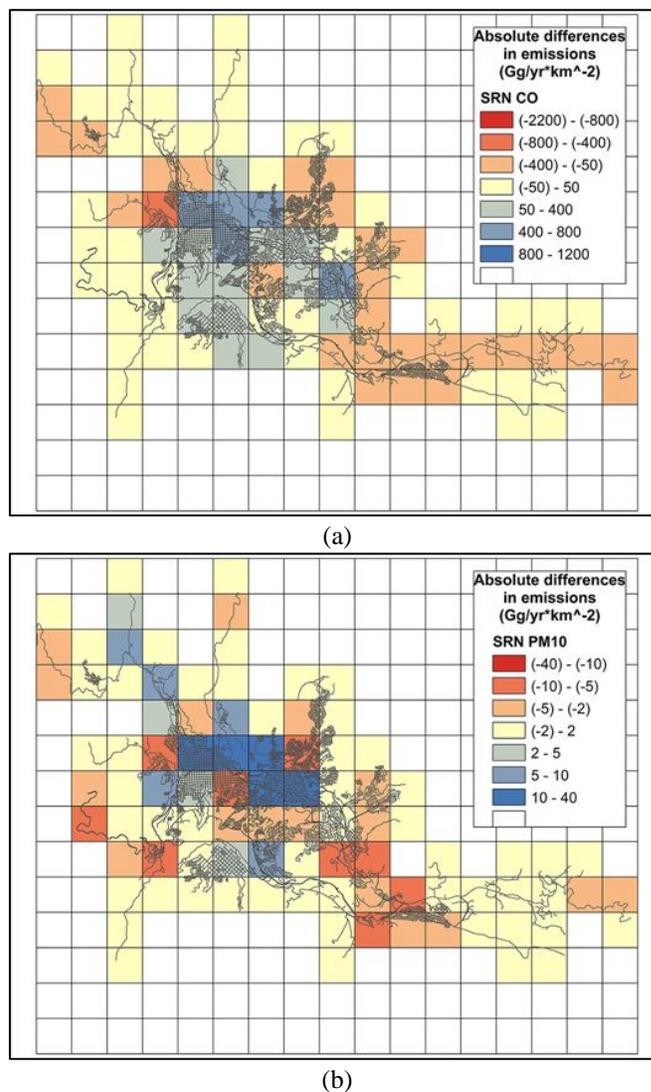


**Figure 8. Relative difference for PM<sub>10</sub> emissions between reference method and simplified methods for the spatial disaggregation of the EI in Manizales. a) Relative difference map against SRN method. b) Percentage of cells that fulfill the breaks of relative difference for all the simplified methods.**

Underestimation in CO and PM<sub>10</sub> fluxes was found in downtown Manizales when the absolute difference of emissions was analyzed. This comparison was performed between the reference TCC method and the better simplified technique, SRN method (characterized by fulfilled the narrow acceptability criterion of 30% from the relative difference described above). Results were obtained comparing the emission per cell in terms of its *absolute emission difference*, computed as  $E_{(TCC),n,j} - E_{(simplified-method),n,j}$  being  $E$  the total emission (Gg/yr\*km<sup>-2</sup>) of pollutant  $n$  in cell  $j$  (Fig. 9). Similar results were obtained for some medium-sized Chilean cities using simplified top-down methods and reporting underestimation of emissions in the city centers characterized by high levels of traffic (Ossés de Eicker et al., 2008; Tuia et al., 2007). A mixed behavior between under and overestimation was found in residential-commercial zones of the city (Fig. 9). Values with the lowest difference in emissions (ranged from -50 to 50 and from -2 to 2 Gg/yr\*km<sup>-2</sup> of CO and PM<sub>10</sub>, respectively), were obtained in the peripheral areas of the city, especially in the industrial zone for PM<sub>10</sub> (Fig. 9b). Better results obtained with SRN method suggests that the use of total traffic counts in a simplified form (e.g. by adding the counts of all vehicle categories independent of the type of vehicle and type of road) could enhance higher uncertainties in the spatial disaggregation of emissions. Hence, the use

of a simplified method based only on road density distribution (such as SRN) in the spatial disaggregation of total emissions could be more recommendable when the information of traffic counts is minimum, and not good enough for applying a traffic count distribution for each vehicular category and type of road. The use of this disaggregation method has been found to be appropriate for other medium-sized cities with areas smaller than 70 km<sup>2</sup>, and with a unique downtown and a simple road network which reflects the traffic activity in various locations of the city; as it was reported by the study of Ossés de Eicker et al. (2008).

This result highlights the importance of using detail and representative information of traffic counts for obtaining a good representation of the EI distribution. In that sense, results obtained from the application of reference method could be improved with additional vehicular counts around these areas without information in traffic flow or, as other authors recommend, assuming correction factors over these roads in which, by technical criteria, traffic flow is not well represented (Ossés de Eicker et al., 2008).



**Figure 9. Absolute emission difference for a) CO and b) PM<sub>10</sub> emissions between reference TCC method and the SRN simplified method, which fulfilled the narrow acceptability criterion of 30%. Negative values denoted overestimation and positive values underestimation of emissions.**

#### 4. Conclusions

Spatial disaggregation of the total EI in the medium-sized Andean city of Manizales was performed successfully in a domain with a resolution of 1km x 1km, through the application of a top-down method based on the analysis of traffic flow levels and road network distribution. Nine disaggregation factors per hour (DFs) were obtained with a higher value of 0.132/km<sup>2</sup> associated with the traffic of passenger cars (PC) in arterial roads of downtown area. Also, motorcycles (2w) reported a considerable DF value of 0.110/km<sup>2</sup>. This result suggested a pressure in the emission of pollutants such as CO and NMVOC in downtown, taking into account that PC and 2w were characterized by the highest releases of these pollutants in the EI.

Overall, the disaggregated EI in Manizales allowed the identification of several hotspots of emission in the downtown zone and the residential and commercial area of Manizales. Higher emissions were obtained in the residential-commercial area with 20124 Gg/yr of CO (46% of total emission among the three zones analyzed) and 356 Gg/yr of PM<sub>10</sub> (47% of total emission). Considering that downtown area is smaller compared to residential and commercial zones, downtown emissions were significant, with 23% of total CO (10025 Gg/yr) and 21% of total PM<sub>10</sub> (159 Gg/yr) releases. This result was highlighted by the percentage contribution of emissions normalized by its total area in km<sup>2</sup>, with values obtained in downtown equal to 6% (CO) and 5% (PM<sub>10</sub>) emissions per km<sup>2</sup>. These indexes were higher than those obtained in residential and commercial area with 2% of emissions of both pollutants per km<sup>2</sup>. The high traffic at downtown is influenced mainly by transit of passenger cars, motorcycles, and buses, producing an important hotspot of pollution in this part of the city.

Temporal distribution allowed the identification of hours with emission peaks in Manizales. CO emissions showed higher peaks at 12h-13h and 17h for the three zones of analysis, with higher CO emissions at midday in residential-commercial zone (786 kg/h), followed by downtown (699 kg/h) and the industrial zone (87 kg/h). In terms of PM<sub>10</sub>, higher emissions were obtained in the residential-commercial zone around 11h (14.2 kg/h), 13h (13.6 kg/h) and 16h (14.3 kg/h). Downtown exhibited important fluxes of PM<sub>10</sub> with maximum peaks around 11h (10.6 kg/h), 14h (11.6 kg/h), and 16h (13.9 kg/h). These emission peaks were directly related with a characteristic driving pattern of zero power in Manizales during rush hours, showing an important influence of PC and 2w in emissions of CO in downtown and residential-commercial area, and the impact of public transport in PM<sub>10</sub> emissions in the residential-commercial zone.

The comparison of emission values per cell in the EI domain, obtained from the reference top-down method (TCC) with respect to other simplified technics, shown that the use of total traffic counts in a simplified form could enhance higher uncertainties in the spatial disaggregation of emissions, compared with those obtained with a simplified method based only on road density distribution. Hence, the use of a simplified method such as SRN in medium-sized cities (area <70km<sup>2</sup>) with a unique downtown, could be more recommendable in those situations when the information of traffic counts is minimum and not good enough for applying a traffic count distribution for each vehicular category and type of road. However, the use of simplified methods could enhance underestimation in the spatial allocation of emissions of pollutants such as CO and PM<sub>10</sub> in downtown Manizales (zone dominated by high traffic of vehicles).

Results obtained could add new information that help to improve the air pollution management system in the city and contribute to local public policy decisions. As well as, top-down methodology described in this study could be applied in other medium-sized cities of the region in the disaggregation of its vehicular emissions. This work provides a baseline of emission fluxes for ongoing research in atmospheric modeling in the city, with the aim to improve the understanding of

transport, transformation, and impacts of pollutant emissions in the atmosphere and its effects on the urban air quality.

### Acknowledgments

The authors acknowledge the regional environmental authority (CORPOCALDAS) for supporting this project through “Convenio Interadministrativo de Asociación 130-2014” and Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales through “Convocatoria para la Movilidad Internacional de la Universidad Nacional de Colombia 2016-2018”. Authors also acknowledge the economic support given by Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación (COLCIENCIAS) through “Programa Jóvenes Investigadores e Innovadores 2015, Facultad de Ingeniería y Arquitectura- Convenio Especial de Cooperación 567-2015” and “Programa Doctoral Crédito-Beca Colciencias 528”. Special thanks to the Transit Secretary Department of Manizales and the Engineering, Energy, and Education Policy Research Group (E3P) from Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales for providing the road network maps and valuable advice. Finally, authors acknowledge to Centro de Ciencia del Clima y la Resiliencia (CR)2 in Chile. Part of this work was conducted during the Sabbatical Fellow of Professor Beatriz Aristizábal, sponsored by Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales – Colombia.

### References

- CETESB (Companhia Ambiental de Estado de São Paulo), 2014. Emissões veiculares no estado de São Paulo 2014. In Portuguese. Available online at: [http://veicular.cetesb.sp.gov.br/wp-content/uploads/sites/35/2013/12/Relat%C3%B3rio-emiss%C3%B5es-veiculares-2014VERS%C3%83O-DIGITAL\\_01.09.pdf](http://veicular.cetesb.sp.gov.br/wp-content/uploads/sites/35/2013/12/Relat%C3%B3rio-emiss%C3%B5es-veiculares-2014VERS%C3%83O-DIGITAL_01.09.pdf). Accessed February 2016.
- Clarke, A.G., Ko, Y.-H., 1996. The relative significance of vehicular emissions and other emissions of volatile organic compounds in the urban area of Leeds, UK. *Sci. Total Environ.* 189–190, 401–407. doi:10.1016/0048-9697(96)05237-0
- CORPOCALDAS (Corporación Autónoma Regional de Caldas), 2014. Medición de ruido ambiental en la ciudad de Manizales. In Spanish. Available online at: <http://www.corpocaldas.gov.co/publicaciones/543/Medicion%20Ruido%20Ambiental%20Manizales%20-%20Parte%201.pdf>. Accessed December 2017.
- CORPOCALDAS (Corporación Autónoma Regional de Caldas), 2015. Mediciones de ruido ambiental y elaboración del Plan de Descontaminación por Ruido en Villamaría, Caldas. In Spanish. Available online at: <http://www.corpocaldas.gov.co/publicaciones/543/Informe%20final%20ruido%20Villamaria-2015%20Reducido.pdf>. Accessed December 2017.
- Costa, M., Baldasano, J.M., 1996. Development of a source emission model for atmospheric pollutants in the Barcelona area. *Atmos. Environ.* 30, 309–318. doi:10.1016/1352-2310(95)00221-J
- D’Angiola, A., Dawidowski, L.E., Gómez, D.R., Osses, M., 2010. On-road traffic emissions in a megacity. *Atmos. Environ.* 44, 483–493. doi:10.1016/j.atmosenv.2009.11.004
- Dalvi, M., Beig, G., Patil, U., Kaginalkar, A., Sharma, C., Mitra, A.P., 2006. A GIS based methodology for gridding of large-scale emission inventories: Application to carbon-monoxide emissions over Indian region. *Atmos. Environ.* 40, 2995–3007. doi:10.1016/j.atmosenv.2006.01.013
- Escobar, D.A., García, F.J., 2012. Diagnóstico de la movilidad urbana de Manizales. In Spanish. Available online at: [http://www.uneditorial.net/uflip/Diagnostico\\_de\\_movilidad\\_urbana\\_de\\_manizales/pubData/source/Diagnostico\\_de\\_movilidad\\_urbana\\_de\\_manizales.pdf](http://www.uneditorial.net/uflip/Diagnostico_de_movilidad_urbana_de_manizales/pubData/source/Diagnostico_de_movilidad_urbana_de_manizales.pdf). Accessed February 2017.
- Gaffney, P., 2002. Developing a Statewide Emission Inventory Using Geographic Information Systems (GIS). US EPA Annual Emission Inventory Conference. Available online at: <https://www3.epa.gov/ttnchie1/conference/ei11/modeling/gaffney.pdf>. Accessed May 2017.
- Gallardo, L., Escribano, J., Dawidowski, L., Rojas, N., de Fátima Andrade, M., Osses, M., 2012. Evaluation of vehicle emission inventories for carbon monoxide and nitrogen oxides for Bogotá, Buenos Aires, Santiago, and São Paulo. *Atmos. Environ.* 47, 12–19. doi:10.1016/j.atmosenv.2011.11.051
- Giraldo, L.A., 2005. Estimación del inventario de emisiones por Fuentes móviles para la ciudad de Bogotá e identificación de variables pertinentes. In Spanish. Universidad de Los Andes, Bogotá, Colombia (Master Thesis).

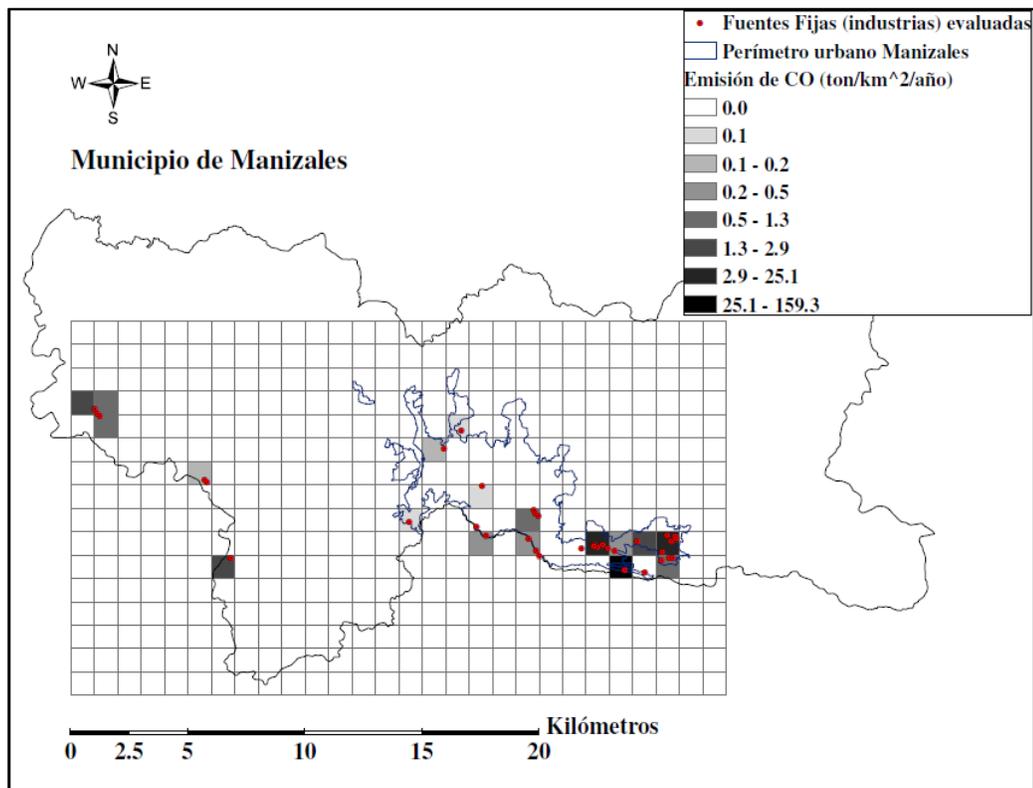
- Gkatzoflias, D., Mellios, G., Samaras, Z., 2013. Development of a web GIS application for emissions inventory spatial allocation based on open source software tools. *Comput. Geosci.* 52, 21–33. doi:10.1016/j.cageo.2012.10.011
- González, C.M., Gómez, C.D., Rojas, N.Y., Acevedo, H., Aristizábal, B.H., 2017. Relative impact of on-road vehicular and point-source industrial emissions of air pollutants in a medium-sized Andean city. *Atmos. Environ.* 152, 279–289. doi:10.1016/j.atmosenv.2016.12.048
- Henríquez, P., 2007. Estudio comparativo de actividad vehicular y modelación de emisiones para Santiago y Buenos Aires. In Spanish. Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile (Bachelor Thesis).
- ISSRC (International Sustainable Research Center), 2008a. IVE Model User's Manual. Version 2.0. Available online at: <http://www.issrc.org/ive/downloads/manuals/UsersManual.pdf>. Accessed January 2014.
- Jenks, G.F., 1963. Generalization in statistical mapping. *Ann. Assoc. Am. Geogr.* 53, 15. doi:10.1111/j.1467-8306.1963.tb00429.x
- Kinney, P.L., 2008. Climate Change, Air Quality, and Human Health. *Am. J. Prev. Med.* 35, 459–467. doi:10.1016/j.amepre.2008.08.025
- Loibl, W., Orthofer, R., Winiwarter, W., 1993. Spatially disaggregated emission inventory for anthropogenic NMVOC in Austria. *Atmos. Environ. Part A. Gen. Top.* 27, 2575–2590. doi:10.1016/0960-1686(93)90031-S
- Manizales Cómo Vamos, 2013. Informe de calidad de vida Manizales. In Spanish. Available online at: [http://manizalescomovamos.org/?page\\_id=2278](http://manizalescomovamos.org/?page_id=2278). Accessed February 2016.
- MIDEPLAN (Ministerio de Planificación de Chile), 2010. Actualización Metodológica MODEM – MODEC para el Gran Santiago. In Spanish. Available online at: [http://www.sectra.gob.cl/contenido/biblioteca/documentos/Actualiz\\_modem\\_modec\\_gran\\_santiago\\_resumen\\_ejecutivo.zip](http://www.sectra.gob.cl/contenido/biblioteca/documentos/Actualiz_modem_modec_gran_santiago_resumen_ejecutivo.zip). Accessed January 2017.
- MMA (Ministerio del Medio Ambiente de Chile), 2012. Reporte 2005-2011 del Registro de Emisiones y Transferencias de Contaminantes. In Spanish. RETC. Available online at: [http://www.retc.cl/wp-content/uploads/2015/07/articulos-57080\\_reporte\\_2005\\_2011.pdf](http://www.retc.cl/wp-content/uploads/2015/07/articulos-57080_reporte_2005_2011.pdf). Accessed May 2016.
- Mu, L., 2009. Thiessen Polygon, in: *International Encyclopedia of Human Geography*. pp. 231–236. doi:10.1016/B978-008044910-4.00545-9
- Ossés de Eicker, M., Zah, R., Triviño, R., Hurni, H., 2008. Spatial accuracy of a simplified disaggregation method for traffic emissions applied in seven mid-sized Chilean cities. *Atmos. Environ.* 42, 1491–1502. doi:10.1016/j.atmosenv.2007.10.079
- Parra, R., Jiménez, P., Baldasano, J.M., 2006. Development of the high spatial resolution EMICAT2000 emission model for air pollutants from the north-eastern Iberian Peninsula (Catalonia, Spain). *Environ. Pollut.* 140, 200–219. doi:10.1016/j.envpol.2005.07.021
- Peñaloza, N.E., 2010. Distribución espacial y temporal del inventario de emisiones provenientes de las fuentes móviles y fijas de la ciudad de Bogotá, D.C. In Spanish. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia (Master Thesis).
- Puliafito, S.E., Allende, D., Pinto, S., Castesana, P., 2015. High resolution inventory of GHG emissions of the road transport sector in Argentina. *Atmos. Environ.* 101, 303–311.
- Pulles, T., Heslinga, D., 2009. The Art of Emission Inventorying. TNO-Environment and Geosciences. (Available online at: [http://www.csb.gov.tr/db/necen/editordosya/file/NEC/CollectER\\_Training/The\\_Art\\_of\\_Emission\\_Inventorying.pdf](http://www.csb.gov.tr/db/necen/editordosya/file/NEC/CollectER_Training/The_Art_of_Emission_Inventorying.pdf) Accessed April 2016).
- Rodríguez, P.A., Behrentz, E., 2009. Actualización del inventario de emisiones de fuentes móviles para la ciudad de Bogotá a través de mediciones directas. In Spanish. Available online at: [http://oab.ambientebogota.gov.co/apc-aa-files/57c59a889ca266ee6533c26f970cb14a/inventario\\_de\\_emisiones\\_fuentes\\_moviles.pdf](http://oab.ambientebogota.gov.co/apc-aa-files/57c59a889ca266ee6533c26f970cb14a/inventario_de_emisiones_fuentes_moviles.pdf). Accessed May 2017.
- Rodríguez, R.A., Virguez, E.A., Rodríguez, P.A., Behrentz, E., 2016. Influence of driving patterns on vehicle emissions: A case study for Latin American cities. *Transp. Res. Part D Transp. Environ.* 43, 192–206. doi:10.1016/j.trd.2015.12.008
- Saide, P., Zah, R., Osses, M., Ossés de Eicker, M., 2009. Spatial disaggregation of traffic emission inventories in large cities using simplified top-down methods. *Atmos. Environ.* 43, 4914–4923. doi:10.1016/j.atmosenv.2009.07.013
- Shu, Y., Lam, N.S.N., 2011. Spatial disaggregation of carbon dioxide emissions from road traffic based on multiple linear regression model. *Atmos. Environ.* 45, 634–640. doi:10.1016/j.atmosenv.2010.10.037
- Thill, J.C., 2000. Geographic information systems for transportation in perspective. *Transp. Res. Part C Emerg. Technol.* 8, 3–12. doi:10.1016/S0968-090X(00)00029-2

- Toro, M.V., Serna, J., Álvarez, N.W., Sánchez, C.G., Ospina, F.E., Quiceno, D.M., Zapata, J.D., 2010. Simulaciones especiales tarea 1: Optimización del inventario de emisiones atmosféricas. In Spanish. Convenio de Asociación, Medellín, Colombia. No. 543 de 2008.
- Toro, M.V., Molina, E., García, P., Quiceno, D.M., Londoño, A., Acevedo, L.F., 2013. Inventario de Emisiones Atmosféricas del Valle de Aburrá, año base 2011. In Spanish. Convenio de Asociación, Medellín, Colombia. No. 243 de 2012.
- Tuia, D., Ossés de Eicker, M., Zah, R., Osses, M., Zarate, E., Clappier, A., 2007. Evaluation of a simplified top-down model for the spatial assessment of hot traffic emissions in mid-sized cities. *Atmos. Environ.* 41, 3658–3671. doi:10.1016/j.atmosenv.2006.12.045
- UN (United Nations), 2014. World Urbanization Prospects: the 2014 Revision, Highlights. Department of Economic and Social Affairs, Population Division, New York.
- US EPA (United States Environmental Protection Agency), n.d. How does an emissions inventory contribute to the air quality management process? (Available online at: <https://www.epa.gov/air-quality-management-process/emissionsinventory#contrib> Accessed May 2016).
- Vara-Vela, A., Andrade, M.F., Kumar, P., Ynoue, R.Y., Muñoz, A.G., 2016. Impact of vehicular emissions on the formation of fine particles in the Sao Paulo Metropolitan Area: A numerical study with the WRF-Chem model. *Atmos. Chem. Phys.* 16, 777–797. doi:10.5194/acp-16-777-2016
- Vivanco, M.G., Andrade, M.D.F., 2006. Validation of the emission inventory in the Sao Paulo Metropolitan Area of Brazil, based on ambient concentrations ratios of CO, NMOG and NOx and on a photochemical model. *Atmos. Environ.* 40, 1189–1198. doi:10.1016/j.atmosenv.2005.10.041
- Voronoi, G., 1907. Nouvelles applications des parametres continus a la theorie des formes quadratiques. In French. *J. für die reine und Angew. Math.* 133, 97–178. doi:10.1515/crll.1908.134.198
- Winiwarter, W., Dore, C., Hayman, G., Vlachogiannis, D., Gounaris, N., Bartzis, J., Ekstrand, S., Tamponi, M., Maffei, G., 2003. Methods for comparing gridded inventories of atmospheric emissions - Application for Milan province, Italy and the Greater Athens Area, Greece. *Sci. Total Environ.* 303, 231–243. doi:10.1016/S0048-9697(02)00473-4

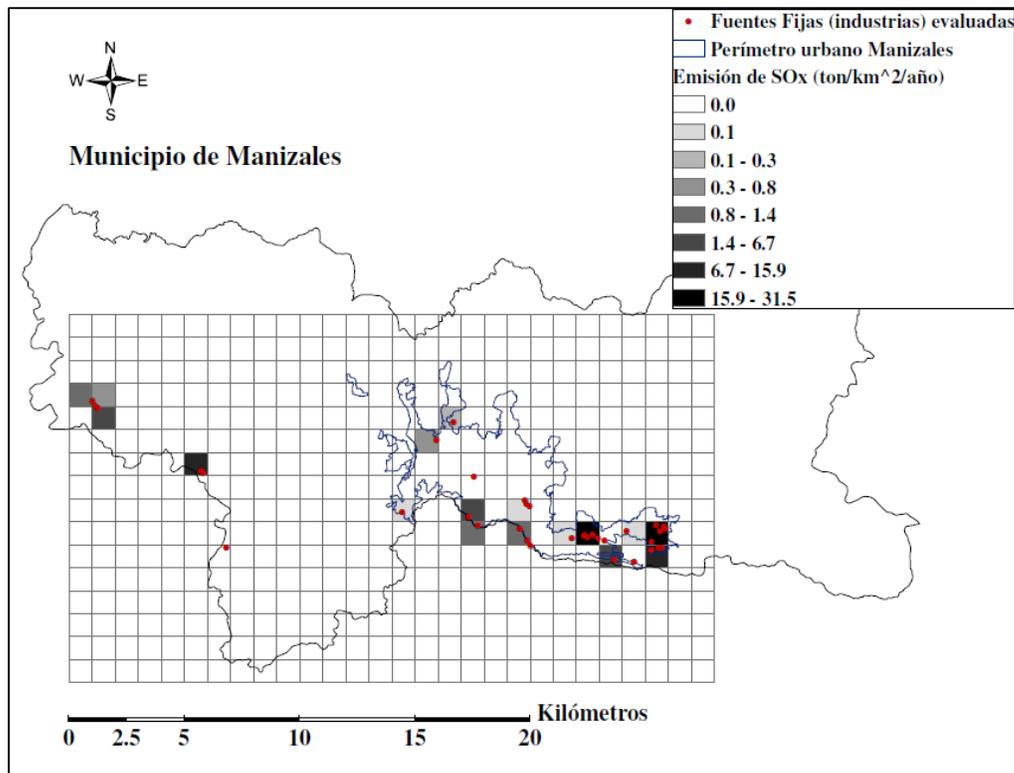
### 2.5.3. DESAGREGACIÓN ESPACIOTEMPORAL DEL INVENTARIO DE EMISIONES POR FUENTES ESTACIONARIAS PUNTALES

#### *Desagregación espacial*

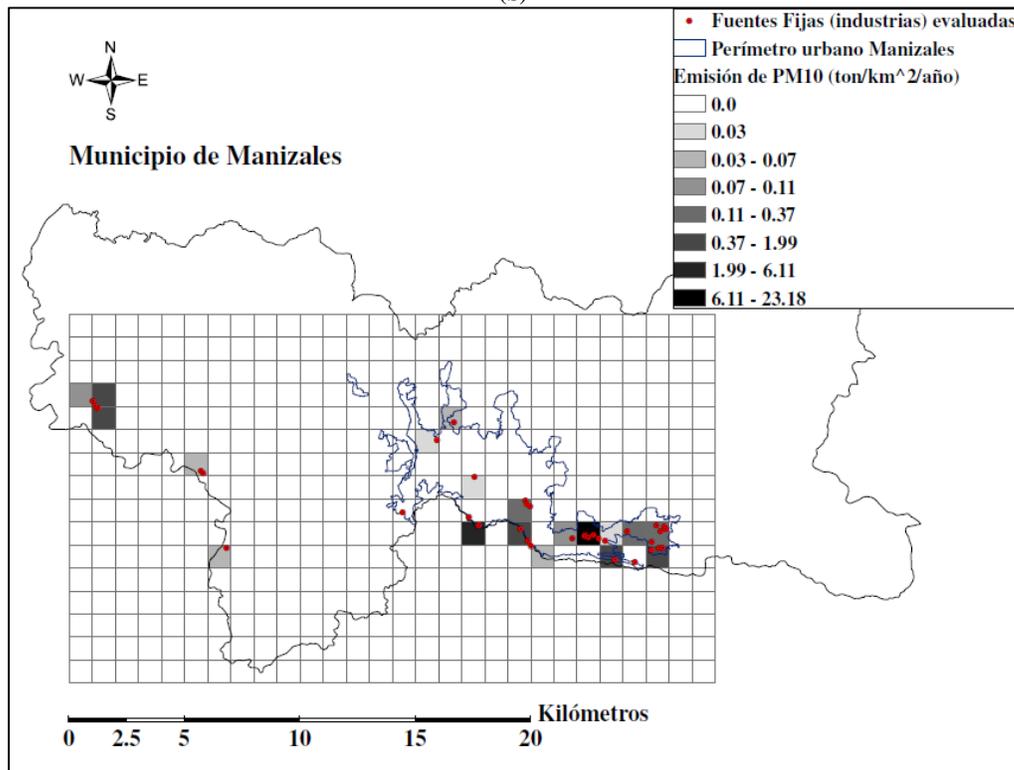
La desagregación espacial de las emisiones por fuentes estacionarias puntuales permitió evidenciar como la zona industrial ubicada al oriente del área urbana de Manizales agrupa las zonas de mayor emisión de los contaminantes evaluados. Lo anterior teniendo en cuenta que esta es la zona donde se tienen la mayoría de industrias y procesos industriales del área de estudio. Este resultado se muestra en la Figura 2.7, donde se incluyen los mapas de desagregación espacial con las emisiones totales anuales para los contaminantes CO (Fig. 2.7a), SO<sub>x</sub> (Fig. 2.7b) y PM<sub>10</sub> (Fig. 2.7c). En el caso de CO, este fue el contaminante que presentó la mayor emisión entre las fuentes estacionarias evaluadas con 219 ton/año. De otra parte, el SO<sub>x</sub> fue el contaminante que registró el mayor aporte de emisión (81.4%), en comparación con las emisiones por fuentes móviles en ruta y el único que supera las emisiones de dicho sector. Finalmente se muestran los resultados para PM<sub>10</sub> teniendo en cuenta que es un contaminante de alta importancia y el de mayor seguimiento en la Red de Vigilancia de Calidad del Aire (RVCA) en la ciudad.



(a)



(b)

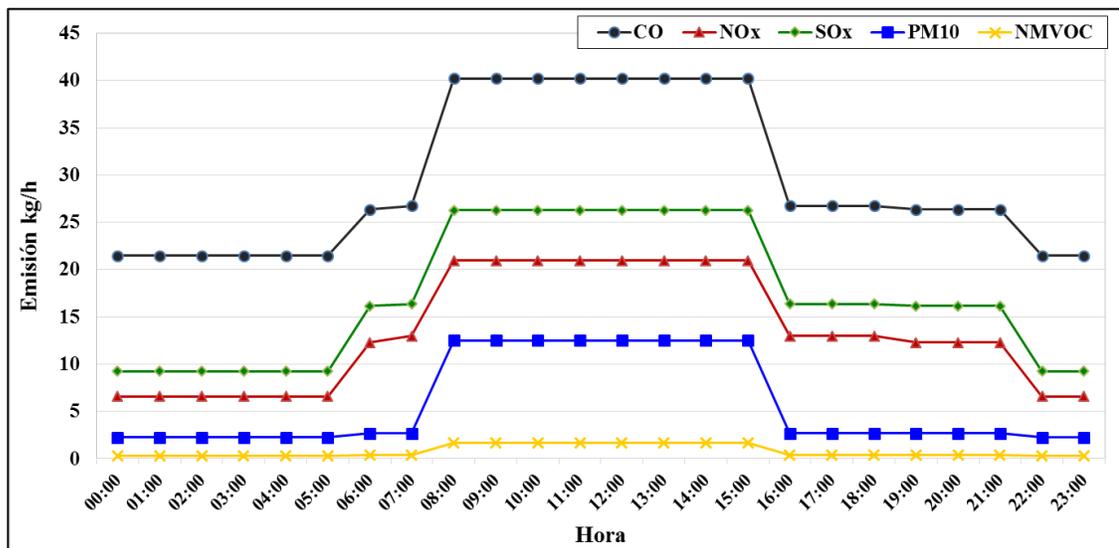


(c)

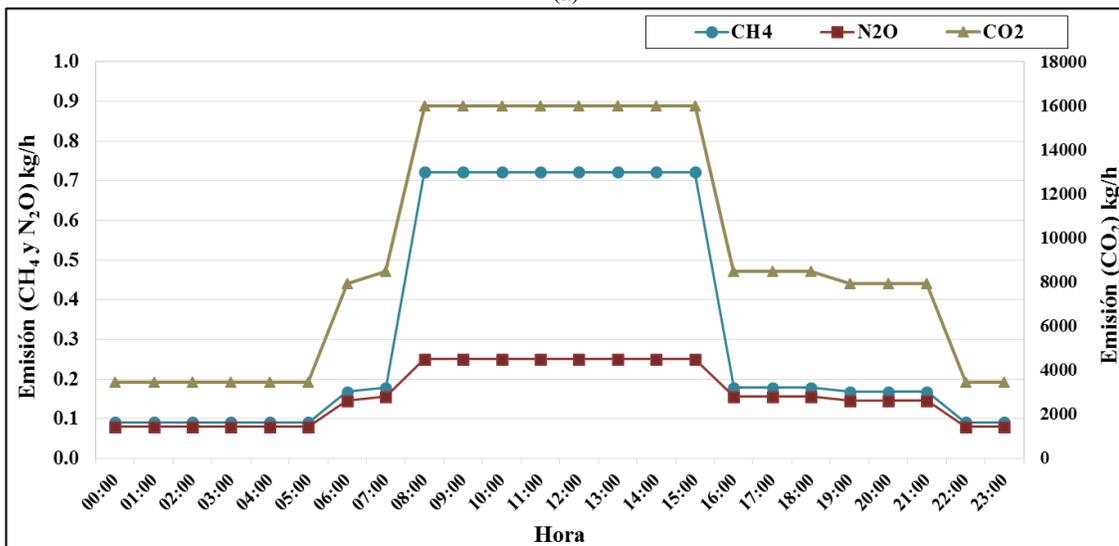
**Figura 2.7. Distribución espacial de emisiones totales anuales provenientes de fuentes estacionarias puntuales en Manizales para un día laboral típico. a) Emisión de CO. b) Emisión de SO<sub>x</sub>. c) Emisión de PM<sub>10</sub>.**

**Desagregación temporal**

En lo que respecta a la desagregación temporal de las emisiones por fuentes estacionarias puntuales, la Figura 2.8 muestra la distribución horaria obtenida mediante la técnica de distribución uniforme según las jornadas de trabajo y operación de equipos, descrita en la sección 2.4.2. Es posible observar cómo se obtiene una curva de emisión con los mayores flujos entre las 08:00 y 15:00 horas del día, un tipo de curva representativo de este tipo de emisiones. Comportamiento similar en las distribuciones temporales de emisiones por fuentes industriales, fueron reportadas en Bogotá en los estudios de Baublitz et al. (2014) y Peñalosa (2010). Este último reporta la aplicación de un método de distribución aleatorio, el cual es diferente al empleado en la presente investigación. Lo anterior sugiere que los resultados obtenidos son coherentes y pueden dar una visión general del comportamiento horario de las emisiones de contaminantes por el sector industrial de la ciudad.



(a)



(b)

**Figura 2.8. Distribución de emisiones horarias provenientes de fuentes estacionarias puntuales en Manizales para un día laboral típico. a) Contaminantes criterio y NMVOC. b) GHG.**

#### **2.5.4. DISCUSIÓN SOBRE RELEVANCIA DE OTRAS FUENTES DE EMISIÓN NO TENIDAS EN CUENTA EN LA ESTIMACIÓN DEL INVENTARIO DE EMISIONES Y POSIBLES FUENTES DE INCERTIDUMBRE**

El IE realizado en la presente investigación se enfocó en la cuantificación de las dos principales fuentes de emisión, las cuales fueron seleccionadas según el criterio de expertos en el diseño del inventario y los estudios revisados sobre IE a nivel local y global (ver Tabla 2.2, sección 2.2 y Table 4, sección 2.5.1). En general, se cuantifican principalmente las emisiones producto de fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales. La inclusión de las principales fuentes para la estimación del inventario, se basó en el hecho de que en la ciudad de Manizales no se había realizado anteriormente la estimación del inventario de emisiones antropogénicas con cubrimiento de toda el área urbana. Sin embargo, es importante analizar otras posibles fuentes de emisión que deberían tenerse en cuenta para futuras actualizaciones del IE, para tener un mayor cubrimiento y análisis de todas las fuentes generadoras de emisiones en la ciudad.

##### ***Importancia de otras fuentes antropogénicas derivadas de actividad vehicular***

Según Beltrán et al. (2012), las emisiones por procesos de resuspensión en vías son una fuente importante de material particulado. Estas emisiones comprenden procesos abrasivos (desgaste de llantas y frenos, desgaste de las superficies), y aquellos asociados a la turbulencia inducida por el tráfico, la fricción en llantas o la acción del polvo. Un estudio desarrollado por Amato et al. (2011) en tres ciudades europeas (Barcelona y Girona en España, y Zúrich en Suiza), resaltó la importancia de las emisiones de material particulado por resuspensión con porcentajes de emisión de  $PM_{10}$  sobre el total de las emisiones vehiculares de ~30% en Zúrich y ~60% en las ciudades españolas de Barcelona y Girona.

En Colombia, las emisiones de  $PM_{2.5}$  y  $PM_{10}$  estimadas en Bogotá por Beltrán et al. (2012), indican que cerca del 40% de la emisión de  $PM_{2.5}$  proviene de polvo resuspendido. Este estudio sugiere que la mayor contribución de emisiones proviene del polvo depositado sobre el suelo, con cerca del 86% de la emisión de  $PM_{10}$  resuspendido, seguido de procesos de desgaste de frenos y llantas con un 9%. Una mayor contribución de emisiones por resuspensión de polvo también es obtenida en los recientes inventarios reportados para Bogotá y resumidos en un reciente informe de la Secretaría Distrital de Ambiente (SDA, 2017). Dicho informe muestra como el  $PM_{10}$  susceptible de resuspensión es predominante en fuentes como la resuspensión de polvo en vías pavimentadas y no pavimentadas (~93% de la emisión total por resuspensión para el año 2014). Este informe establece además que las emisiones por resuspensión en Bogotá para el año 2014 aportaron el 86% de la emisión total de  $PM_{2.5}$  y el 94% de la emisión total de  $PM_{10}$ .

Se observa claramente como la contribución total de la emisión de material particulado por resuspensión difiere al comparar los estudios de Beltrán et al. (2012) y el informe de la SDA (2017). Esto demuestra la alta incertidumbre que existe en el cálculo de este tipo de emisiones, factor que es resaltado no solo en las publicaciones mencionadas, sino también por otros estudios tanto a nivel local (Méndez et al., 2017; Pérez-Peña et al., 2017) como internacional (Amato et al., 2011). Esta incertidumbre tiene que ver con las diferentes variables que deben tenerse en cuenta en la estimación de estas emisiones. Por ejemplo, Amato et al. (2011) destaca que la falta de factores de emisión obtenidos en las zonas de estudio específicas, es una fuente de incertidumbre importante debido a las diferencias que se tienen en el clima, tipo de vías y tráfico. Por su parte, el estudio de Pérez-Peña et al. (2017), destaca la influencia de variables como la precipitación y humedad sobre los niveles de PM resuspendido. En este sentido, dicho estudio expone una metodología de estimación basada en factores de mitigación de precipitación y humedad en una base horaria, con el fin de reducir las incertidumbres asociadas al método base de la EPA, cuya estimación se realiza a partir de factores

de mitigación en una base anual según registros de precipitación diaria. La aplicación de esta metodología para la ciudad de Bogotá, evidenció una reducción en las emisiones estimadas de PM por resuspensión al compararlas con el inventario base, estimado a partir de factores de mitigación anuales. Las reducciones obtenidas fueron del 40% para periodo seco y 46 % para periodo húmedo.

A pesar de la incertidumbre que puede presentar la estimación de emisiones por resuspensión, existe un consenso general sobre su importancia en las emisiones de material particulado proveniente de fuentes móviles. En este sentido, es recomendable que futuras actualizaciones del inventario de emisiones en la ciudad de Manizales tengan en cuenta las emisiones de PM por resuspensión, principalmente aquellas asociadas a polvo resuspendido y desgaste de frenos y llantas.

### ***Importancia de otras fuentes antropogénicas derivadas de actividad industrial***

En el tema de las fuentes estacionarias, IE publicados recientemente en ciudades principales de Colombia como Bogotá (SDA, 2017), Medellín (Toro et al., 2015) y Cali (DAGMA, 2012), muestran también el aporte de las fuentes de emisión estacionarias de área; principalmente las estaciones de servicio y centros de almacenamiento de combustible. Este tipo de fuentes podría generar aportes a las emisiones de VOC, contaminante fundamental en la química de formación de ozono. En este sentido, la inclusión de este tipo de emisiones en futuras actualizaciones del IE en Manizales, podrían complementar el aporte de fuentes estacionarias a las emisiones de VOC en la ciudad. Lo anterior teniendo en cuenta que la zona industrial de Maltería (al oriente de la ciudad) cuenta con una planta de almacenamiento de combustible. Asimismo, existen alrededor de 35 estaciones de servicio de combustible distribuidas en la ciudad (La Patria, 2016). Otra fuente de área importante en la ciudad y que podría contribuir con emisiones de NMVOC y gases efecto invernadero como el CH<sub>4</sub>, es el relleno sanitario, ubicado al norte del área urbana.

### ***Posibles fuentes de incertidumbre en el inventario de emisiones***

Los ejercicios de estimación de IE implican un gran número de variables de entrada que deben ser obtenidas a partir de información primaria y secundaria, en este sentido, las fuentes de incertidumbre son variadas y están inevitablemente presentes en los IE. Esta sección pretende realizar una discusión breve sobre las fuentes de incertidumbre que se consideran más relevantes en el caso concreto del IE estimado para la ciudad de Manizales.

Una primera fuente de incertidumbre puede estar asociada al hecho de que el IE tuvo en cuenta únicamente las fuentes de emisión principales, y como se mencionó anteriormente, existen otras fuentes de emisión que podrían aportar flujos de contaminantes a la atmósfera. Por ejemplo, en el caso de las emisiones de PM podría existir una subestimación de las emisiones vehiculares, incertidumbre que puede reducirse al incluir en futuros ejercicios de actualización del inventario, otras fuentes de emisión como la resuspensión de PM en vías.

Específicamente en el tema de las emisiones por fuentes móviles, se destaca el estudio realizado por Gómez (2017), trabajo de Maestría que, como apoyo a la presente investigación, se enfocó en la desagregación espaciotemporal del inventario de emisiones. Gómez (2017) realizó además un ejercicio de análisis de sensibilidad para cuatro variables de entrada principales, asociadas a las emisiones por fuentes móviles en ruta (perfiles de flujo vehicular y patrones de conducción) y las emisiones por partidas (partidas totales y la distribución de partidas). En el grupo de emisiones en ruta, los resultados permitieron concluir que la variable de patrones de conducción presenta la mayor sensibilidad, con variaciones de hasta el 30% en las emisiones unitarias del contaminante CO. De otra parte, la mayor sensibilidad en el grupo de emisiones por partidas fue registrada por la variable de partidas totales, con variaciones de hasta 40% en la emisión unitaria de CO. Estos resultados

resaltan la importancia de una estricta planificación y elaboración de la campaña de campo para la obtención de los patrones de conducción requeridos por el modelo IVE. Asimismo, la importancia de la realización de un mayor número de encuestas en campo para obtener el número de partidas totales por categoría vehicular. Aspecto que puede mejorarse en futuras actualizaciones del IE en Manizales.

Otra variable que se consideran de gran importancia en la estimación de las emisiones por fuentes móviles, tiene que ver con los datos de actividad en términos de kilómetros recorridos por categoría vehicular (VKT), principalmente para las categorías de vehículo particular y motos. Para estas categorías, la estimación del VKT se basó en un análisis de los km registrados por el odómetro durante los años de funcionamiento del vehículo. Con esta información, se realiza una curva de correlación entre la edad del vehículo y la lectura del odómetro, como se muestra en el Anexo A (Figure A.6). Este procedimiento trae consigo una incertidumbre asociada, en primer lugar por el tamaño de muestra analizada, que generalmente es una porción de la flota vehicular. En segundo lugar, este tipo de análisis podría no tener en cuenta el comportamiento propio de la zona urbana, ya que muchos vehículos realizan viajes por fuera del área urbana incrementando los km recorridos durante su vida útil. Por lo tanto, esta variable debe ser analizada en detalle para futuras actualizaciones del inventario de emisión, intentando hacer cálculos adicionales, por ejemplo a partir de modelos de tráfico.

En el caso de las emisiones por fuentes industriales puntuales, las estimaciones se realizaron a partir de información de mediciones directas y la estimación por factores de emisión publicados por la EPA en la base de datos AP-42. En términos de las mediciones directas, en este estudio se realizó una revisión rigurosa y crítica de los estudios de medición en fuentes fijas, teniendo en cuenta que algunos reportes de monitoreo en fuentes fijas presentan inconsistencias en sus resultados finales y por ende, dichas emisiones no deben tenerse en cuenta en la cuantificación final de los resultados del inventario. Este es un punto importante y debe ser tenido en cuenta para futuras actualizaciones del IE, donde las revisiones de los expedientes ambientales deben ser realizadas por personal idóneo con conocimientos en el área. En el caso de la aplicación de la metodología de factores de emisión, es importante tener presente la importancia de seleccionar los factores de emisión para las condiciones propias de los procesos y equipos fuente específicos. Las bases de datos de la EPA contienen una gran variedad de factores y una selección errónea de los mismos podría aumentar aún más las incertidumbres en la estimación. Este hecho se suma a las carencias que se tienen en Colombia en cuanto a información sobre factores de emisión locales, tema que también aporta incertidumbre a la estimación de las emisiones por fuentes estacionarias.

## CAPÍTULO 3

### APLICACIÓN DE MODELIZACIÓN NUMÉRICA PARA EL ESTUDIO DE LA CALIDAD DEL AIRE EN MANIZALES

#### 3.1. LOS MODELOS EULERIANOS Y EL ESTUDIO DE LA CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA

La atmósfera es un sistema reactivo extremadamente complejo, en el cual numerosos procesos físicos y químicos ocurren simultáneamente (Seinfeld y Pandis, 2006). En este sentido, la simulación y predicción de la calidad del aire es un tema que involucra factores meteorológicos (como velocidad y dirección del viento, turbulencia, radiación, nubes y precipitación) y procesos químicos (como transformación y deposición). Hay una evidencia clara sobre la importancia de la meteorología en la definición de la calidad del aire. Por ejemplo la radiación solar, las nubes y la precipitación influyen fuertemente las transformaciones químicas y procesos de remoción, además, los cambios en patrones de vientos y fenómenos de turbulencia afectan el transporte de especies químicas. A su vez se ha demostrado la influencia de las especies químicas emitidas a la atmósfera sobre la meteorología, por cambios en el balance radiativo y efectos en la microfísica de nubes (Grell et al., 2005; Fernández et al., 2010; Grell y Baklanov, 2011; Stuefer et al., 2013). Según Arellano (2013), las condiciones meteorológicas y por ende, de calidad de aire en áreas urbanas, son determinadas por las características de circulación atmosférica, tanto a escala sinóptica como local. Por lo tanto, es de suma importancia el estudio conjunto de los patrones de circulación atmosférica y su influencia sobre los fenómenos de formación y dispersión de contaminantes del aire en áreas urbanas.

La modelización numérica de la atmósfera provee un marco para la integración de nuestra comprensión de los procesos atmosféricos en forma individual y el estudio de sus interacciones. En estudios de calidad del aire, modelos atmosféricos que involucran la descripción de los patrones de emisión, meteorología, transformaciones químicas y procesos de remoción, son una herramienta esencial para establecer la relación entre los flujos de emisión de contaminantes atmosféricos y sus concentraciones en aire ambiente (Seinfeld y Pandis, 2006). Sumado a esto, en regiones donde el acceso a mediciones in situ y en tiempo real de contaminantes atmosféricos es limitado, el uso de modelos atmosféricos se constituye en una herramienta de gran utilidad para su estudio de formación y dispersión, definición de zonas críticas de contaminación y finalmente la correcta implementación de pronósticos y evaluación de escenarios (Arellano, 2013).

Los modelos atmosféricos se pueden dividir en dos grandes grupos: los modelos físicos y los modelos matemáticos. En este último grupo se encuentran los modelos deterministas, los cuales están basados en la descripción fundamental de los procesos físicos y químicos de la atmósfera (Seinfeld y Pandis, 2006). En el grupo de los modelos deterministas se encuentran los modelos eulerianos de transporte químico tridimensional (3-D CTM por sus siglas en inglés), los cuales son modelos de última generación comúnmente empleados en el estudio y predicción de la química atmosférica (Jiménez-Guerrero, et al., 2008; Longo et al., 2013). Los modelos de transporte químico

pueden clasificarse según su escala espacial (Tabla 3.1), siendo los modelos de mesoescala aquellos utilizados para estudios de calidad del aire a nivel urbano, con resoluciones típicas entre 1 km y 4 km en los dominios de mayor resolución. Según Borge et al. (2014), los modelos eulerianos de transporte químico equipados con esquemas fotoquímicos, pueden describir de forma consistente procesos de transformación y transporte de especies como el ozono troposférico y sus precursores ( $\text{NO}_x$  y VOC), principales contaminantes involucrados en las complejas reacciones fotoquímicas que afectan la calidad del aire tanto a nivel urbano como continental.

**Tabla 3.1. Definición de tipos de modelos de transporte químico según su escala espacial (Seinfeld y Pandis, 2006)**

Modelo	Escala típica del dominio	Resolución típica
Microescala	200x200x100m	5 m
Mesoescala (urbano)	100x100x5km	1 – 4 km
Regional	1000x1000x10km	20 – 36 km
Sinóptico (continental)	3000x3000x20km	80 km
Global	65000x65000x20km	5°x5° <sup>a</sup>

<sup>a</sup>1° equivale a una distancia aproximada de 111 km

Uno de los modelos eulerianos de transporte químico ampliamente utilizados por la comunidad científica es el *Weather Research and Forecasting model with Chemistry* (WRF-Chem) (Grell et al., 2005), seleccionado en este trabajo para el estudio de la calidad del aire en Manizales. WRF-Chem es un modelo de código libre, adaptable y útil para la modelización de la química y la meteorología en un amplio rango de escalas (Fernández et al., 2010). Una de las características importantes de este modelo, que influyó enormemente en su selección para este trabajo, tiene que ver con la disponibilidad de información y soporte. Lo anterior, teniendo en cuenta la complejidad que caracteriza la implementación de este tipo de herramientas, especialmente en una zona donde nunca se ha explorado su uso, como es el caso de Manizales. El modelo WRF-Chem dispone de una amplia documentación proveniente no solo de las entidades que desarrollaron la herramienta, sino también de los distintos grupos de investigación que lo han utilizado para estudios de contaminación del aire en diferentes partes del mundo.

### 3.2. GENERALIDADES SOBRE EL MODELO WRF-CHEM

WRF-Chem es un modelo on-line no hidrostático útil para estudios de calidad del aire a nivel de mesoescala, desarrollado gracias al trabajo conjunto entre entidades como NOAA/ESRL/NCEP (National Oceanic and Atmospheric Administration / Earth System Research Laboratory / National Center for Environmental Prediction), NCAR (National Center for Atmospheric Research), PNNL (Pacific Northwest National Laboratory), y el apoyo de universidades e investigadores de varios países.

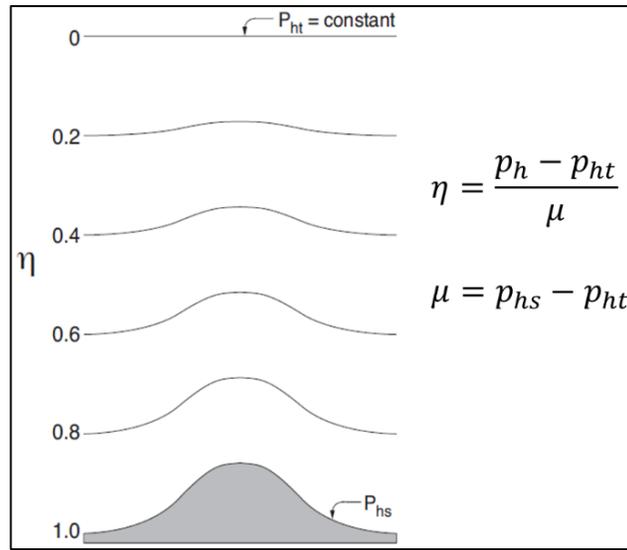
El modelo está conformado por un componente meteorológico y un componente químico. Este último con la capacidad de considerar de forma acoplada procesos físicos y químicos como la emisión, mezcla turbulenta, transporte, transformaciones químicas e interacciones de especies gaseosas y aerosoles, fotólisis, radiación y deposición (Grell et al., 2005). En cuanto al componente meteorológico, el núcleo dinámico utilizado en el modelo corresponde al ARW (Advance Research WRF), utilizado actualmente por el IDEAM con fines de pronóstico para el territorio Colombiano. En este núcleo, las ecuaciones de pronóstico están formuladas para variables conservativas, mientras

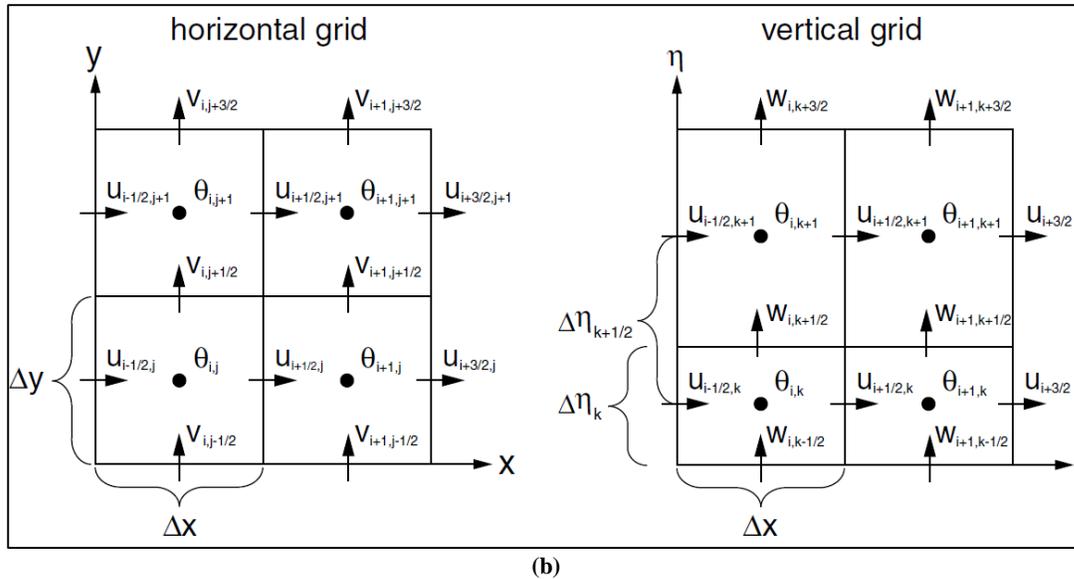
que las variables no conservativas como temperatura y presión se calculan a partir de las variables conservativas pronosticadas. Bajo esta aproximación, el modelo ARW integra una ecuación de conservación de masa y una ecuación de conservación escalar de la forma (Grell et al., 2005):

$$\mu_t + \nabla \cdot (V\mu) = 0 \quad (3.1)$$

$$(\mu\phi)_t + \nabla \cdot (V\mu\phi) = 0 \quad (3.2)$$

En las ecuaciones 3.1 y 3.2  $\mu$  es la masa de la columna de aire seco,  $V$  la velocidad en sus tres componentes  $(u, v, w)$  y  $\phi$  es la razón de mezcla escalar. Estas ecuaciones se discretizan en una formulación de volumen finito haciendo que el modelo conserve la masa y masa escalar. Las ecuaciones dinámicas en el ARW se formulan siguiendo una coordenada vertical adimensional ( $\eta$ ), que relaciona las presiones en superficie ( $p_{hs}$ ) y sobre el límite superior del dominio ( $p_{ht}$ ), con la componente hidrostática de la presión en un nivel determinado ( $p_h$ ). La coordenada  $\eta$  se caracteriza por ajustarse al contorno del terreno como se esquematiza en la Figura 3.1a, variando entre cero (en el límite superior del dominio) y uno (en la superficie). Otras características en el ARW tienen que ver con el uso de un esquema Runge-Kutta de 3er orden para integración temporal, y de una grilla horizontal tipo Arakawa - C (Figura 3.1b), en la cual las variables como la temperatura potencial ( $\theta$ ), la masa de la columna de aire seco ( $\mu$ ) y las razones de mezcla ( $q$ , masa por masa de aire seco), se localizan en el centro de la celda en los denominados *puntos de masa*. Una descripción detallada de las formulaciones matemáticas y las opciones que contemplan los componentes meteorológico y químico del modelo WRF-Chem puede consultarse en Skamarock et al. (2008) y Grell et al. (2005).





**Figura 3.1.** Esquemas de representación de (a) la coordenada vertical  $\eta$ , y (b) la grilla tipo C empleados en el núcleo dinámico ARW. Tomado de Skamarock et al. (2008).

### 3.2.1. ESTRUCTURA DEL MODELO WRF-CHEM

El WRF-Chem contempla cuatro programas o componentes principales (Peckham et al., 2015a):

- Un sistema de preprocesamiento (WPS)
- Un sistema opcional de asimilación de datos (WRF-Var).
- El componente central, ARW solver, que incluye la parte química
- Los programas de postprocesamiento.

La Figura 3.2 muestra el diagrama de flujo del sistema de modelización, resaltando los componentes utilizados en las simulaciones realizadas para Manizales. Como se observa en este diagrama, el primer paso de la simulación contempla el uso del programa WPS (WRF Preprocessing System) para el preprocesamiento de la información estática (que no varía con el tiempo) y meteorológica (proveniente de un modelo global).

#### *El sistema WRF Preprocessing System (WPS)*

El WPS se utiliza en simulaciones de casos reales y se encarga del preprocesamiento de la información meteorológica y estática (topografía, usos y tipos de suelo, entre otros). Las funciones principales del WPS incluyen (Wang et al., 2009):

- Definición del dominio de la simulación.
- Interpolación de los datos estáticos en el dominio seleccionado.
- Extracción de la información meteorológica proveniente de modelos globales de baja resolución e interpolación sobre el dominio de la simulación.

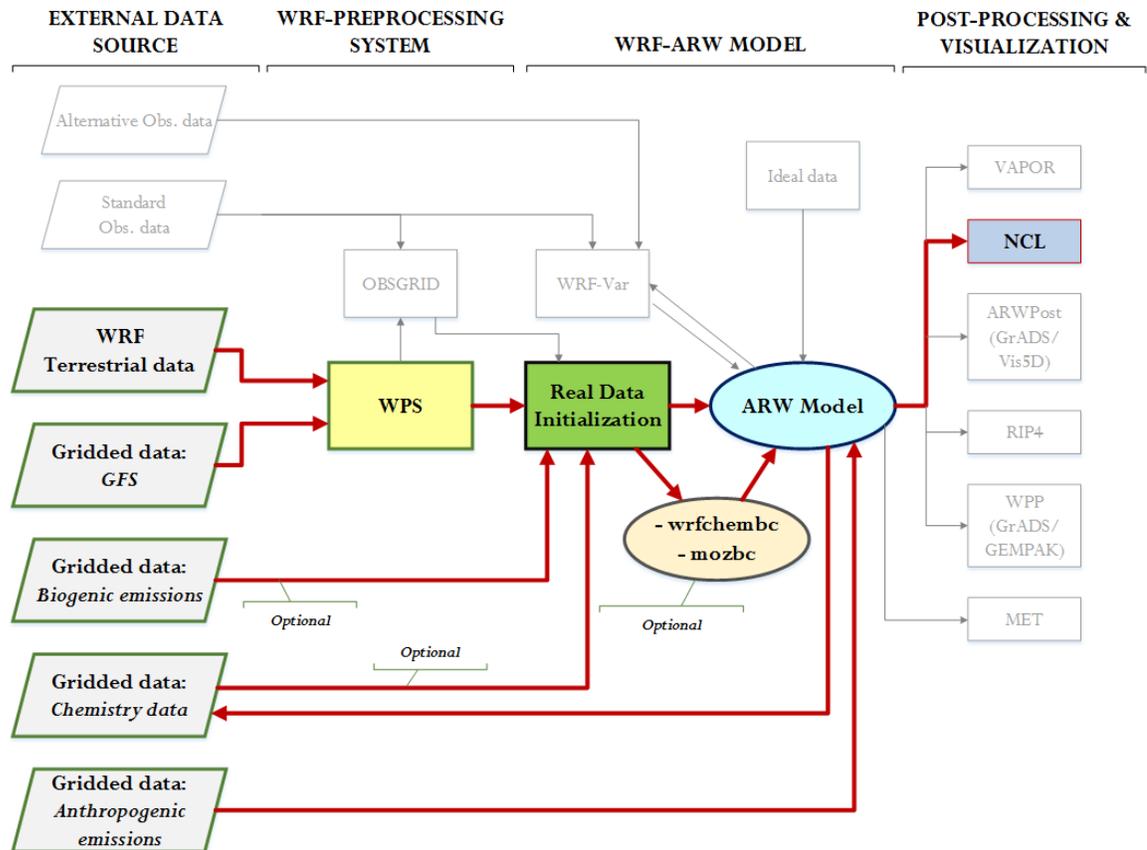


Figura 3.2. Diagrama de flujo del sistema de modelización WRF-Chem resaltando los componentes utilizados en esta investigación. Adaptado de Peckham et al. (2015a)

Para llevar a cabo estas etapas, el WPS posee tres subprogramas denominados *geogrid.exe*, *ungrib.exe* y *metgrid.exe*. En *geogrid* se especifica la fuente de información que suministrará los datos del terreno, los cuales serán interpolados sobre el dominio de la simulación. Este proceso se realiza a través de una lista de entrada denominada “*namelist.wps*”. Los datos del terreno pueden ser obtenidos a través de bases de datos globales que están disponibles en la página web del modelo WRF (<http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/>), y proporcionan información de altura del terreno, categorías y usos de suelo, temperatura media del suelo, cobertura de vegetación, albedo y tipos de pendientes.

En la especificación del dominio, se define el tamaño del dominio de menor resolución (dominio madre) y los dominios de menor tamaño (mayor resolución) que estarán anidados (“*nested domains*”), indicando el número de puntos de grilla y la resolución horizontal. El uso de dominios anidados permite realizar un procedimiento de “*downscaling*” dinámico de la información meteorológica de entrada (que generalmente es de baja resolución, por ejemplo  $1^\circ$ ,  $0.5^\circ$  o  $0.25^\circ$ ) entre el dominio madre y los dominios más finos. Este procedimiento permite mejores resultados para el dominio de interés (el más pequeño y de mayor resolución espacial). En *geogrid* se define también el tipo de proyección a emplear con el fin de generar la menor distorsión al proyectar las distancias del dominio seleccionado. En el caso de simulaciones para regiones en latitudes bajas (caso de Colombia) es recomendable la proyección tipo Mercator (Wang et al., 2009).

En la lectura de la información meteorológica requerida por WRF, se utiliza el *ungrib* para extraer la información existente en archivos tipo GRIB (General Regularly-Distributed Information in

Binary). Esta información proviene de modelos globales de baja resolución como el modelo GFS (Global Forecast System), desarrollado por la NOAA y cuya información fue utilizada en este estudio. *Ungrib* extrae la información meteorológica de entrada y la reescribe en archivos intermedios. Finalmente el programa *metgrid* interpola horizontalmente la información meteorológica generada por *ungrib* en los dominios definidos por el programa *geogrid*.

### ***El sistema ARW solver***

Este componente contiene un programa de inicialización (para casos reales es el *real.exe*) y el programa de integración numérica (*wrf.exe*). En el programa *real*, la información meteorológica proveniente del WPS es interpolada verticalmente, generando además las condiciones iniciales y de contorno que son la información de entrada para correr el programa de integración numérica *wrf.exe*. Como las simulaciones con dominios anidados se pueden realizar especificando si su interacción se da en una (one-way nesting) o dos direcciones (two-way nesting), el modelo dispone de un programa adicional denominado *ndown.exe* para simulaciones en modo one-way nesting. En este tipo de anidamiento los resultados del dominio mayor son utilizados como condición de contorno para el dominio anidado. Las opciones de los programas *real* y *wrf* son definidas a través de un archivo denominado “*namelist.input*”. En este archivo se especifica, por ejemplo, uno de los componentes más importantes en las simulaciones que es la configuración de parametrizaciones físicas y opciones químicas.

## **3.2.2. BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS PARAMETRIZACIONES FÍSICAS DEL MODELO WRF-CHEM**

En simulaciones con modelos numéricos, la imposibilidad de representar los procesos que se dan en escalas horizontales menores al tamaño de las celdas en el dominio (procesos de subescala), hace necesario el uso de parametrizaciones (Jiménez, 2016). Como se muestra en la Figura 3.3, diferentes procesos son susceptibles de esquemas de parametrización física en el modelo WRF-Chem, y se caracterizan por interactuar entre sí. Estas interacciones generan impactos en los resultados las variables de pronóstico, principalmente las variables en superficie (Arango, 2014). A continuación se realiza una breve descripción de las características principales de las parametrizaciones físicas que utiliza el modelo, haciendo énfasis en los esquemas evaluados en las simulaciones del presente estudio.

### ***Microfísica***

Los esquemas de microfísica resuelven los procesos de condensación y evaporación, así como la fase en la cual el agua se encuentra en la atmósfera (Arellano, 2013; Vara-Vela, 2013). Según Jiménez (2016), a resoluciones por debajo de los 10 km, los procesos que dan lugar al desarrollo y evolución de sistemas nubosos no son resueltos, haciendo necesario esquemas explícitos de parametrización que representen la microfísica de nubes y procesos de precipitación. Los esquemas considerados en este estudio (Purdue-Lin y WSM6), son esquemas de conjunto (*bulk parameterization*) que se caracterizan por incluir 6 hidrometeoros (vapor de agua, agua en la nube, lluvia, hielo en la nube, nieve y graupel). El esquema de Purdue-Lin, basado en los estudios de Lin et al. (1983) y Rutledge y Hobbs (1983), es un esquema relativamente sofisticado y recomendado para ejercicios de investigación (Vara-Vela, 2013). De otra parte, el esquema WSM6 hace parte del grupo de esquemas de momento simple. Según Hong y Lim (2006), este tipo de esquemas proveen una representación más realista de los procesos de formación de hielo en la nube, siendo el WSM6

el esquema más completo al incluir además la variable grupel (conocida también como granizo pequeño).

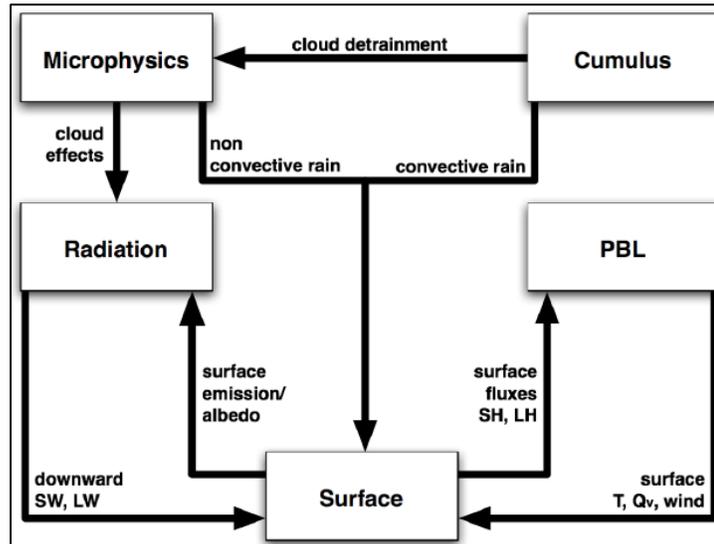


Figura 3.3. Interacciones entre procesos representados mediante parametrización física en WRF-Chem. Tomado de Dudhia (2015)

### *Cúmulos*

Las parametrizaciones de cúmulos son responsables de los efectos a nivel de subescala de nubes convectivas (profundas) y/o someras, intentando representar los flujos verticales (ascendentes y descendentes) no resueltos y movimientos compensatorios que ocurren por fuera de las nubes (Skamarock et al., 2008). La convección profunda tiene importantes efectos en el ciclo hidrológico, por la generación de una fuerte expansión vertical de masas de aire húmedo y la remoción de agua de la atmósfera cuando hay precipitación. De otra parte, la convección somera produce principalmente efectos sobre el balance energético en superficie por las sombras producidas sobre el terreno (Jiménez, 2016). En este estudio fueron evaluadas las parametrizaciones Grell 3D, que considera efectos de subsidencia en las columnas de celdas vecinas (siendo adecuada para grillas menores a 10 km), y Grell-Freitas, esquema recomendado también para simulaciones en alta resolución. En general, estas parametrizaciones no deben ser utilizadas a resoluciones altas (por ejemplo  $\leq 5$  km), en las cuales el modelo puede resolver los eddies convectivos de forma explícita (Skamarock et al., 2008).

### *Capa límite planetaria*

La capa límite planetaria (PBL por sus siglas en inglés) es responsable por los flujos verticales a nivel de subescala debido al transporte turbulento, tanto en la capa límite como en toda la columna atmosférica. En este sentido, los esquemas de PBL resuelven los perfiles de flujo en el interior de la capa de mezcla y la capa estable, distribuyendo en toda la columna vertical las tendencias de temperatura, humedad y momento horizontal (Skamarock et al., 2008). Los esquemas de capa límite se pueden dividir en dos grupos principales. El primero es conocido como método de cierre local, en el cual los flujos turbulentos en cada punto de grilla son estimados a partir de valores y gradientes de las variables atmosféricas en ese punto. Caso contrario sucede con el segundo método, conocido como esquema de cierre no local, en el cual las incógnitas son parametrizadas en función de valores en diferentes puntos de la columna atmosférica, por ende, las propiedades de una capa pueden

mezclarse con las otras capas en la PBL (Arango, 2014; Jiménez, 2016). Según Cuchiara et al. (2014), esquemas de cierre no local pueden generar mejores aproximaciones en condiciones convectivas (durante el día por ejemplo). En este estudio fueron evaluados los esquemas YSU y ACM2, caracterizados por ser esquemas de cierre no local de primer orden. Una diferencia importante entre ambos radica en que el método ACM2 puede comportarse como un método de cierre local durante condiciones estables de la PBL, garantizando alturas más bajas de la capa límite en las noches (Hu et al., 2010; Hariprasad et al., 2014).

### ***Radiación***

Los esquemas de radiación proveen los perfiles de calentamiento atmosférico debido a los flujos radiativos de onda corta (SW) y larga (LW) que mantienen el balance energético del planeta. La radiación de onda larga considera la radiación infrarroja o térmica, absorbida y emitida por gases y superficies. En la estimación de radiación de onda larga desde el suelo, se tiene en cuenta la emisividad de la superficie que depende del tipo de uso de suelo y la temperatura de ésta; mientras que la radiación en la atmósfera responde a la distribución de nubes y vapor de agua, así como a las concentraciones de gases como CO<sub>2</sub> y O<sub>3</sub>. De otra parte, la radiación de onda corta incluye como única fuente el sol, teniendo en cuenta procesos de absorción, reflexión y dispersión en la atmósfera y la superficie. Este tipo de radiación considera longitudes de onda en el espectro visible y longitudes próximas que componen el espectro solar (Skamarock et al., 2008; Arellano, 2013; Vara-Vela, 2013). En este trabajo, el esquema RRTM se utilizó para radiación de onda larga. Este esquema se caracteriza por utilizar tablas preestablecidas para representar procesos asociados a la presencia de vapor de agua, CO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> y gases traza, así como una estimación para la profundidad óptica de nubes (Vara-Vela, 2013). En el caso de radiación de onda corta, se evaluaron los esquemas de Goddard y Dudhia. El esquema Goddard posee 11 bandas espectrales y considera componentes de radiación solar directa y difusa, además de perfiles climatológicos que son considerados para el O<sub>3</sub>. Por su parte, Dudhia tiene en cuenta una simple integración descendente del flujo solar, contabilizando la dispersión en días despejados, así como el albedo y la absorción en nubes (Skamarock et al., 2008).

### ***Procesos en superficie***

Las parametrizaciones de procesos en superficie hacen referencia a esquemas asociados con la capa superficial, la superficie del terreno y la superficie urbana. En los esquemas de capa superficial se calculan las velocidades de fricción y los coeficientes de intercambio, necesarios en los modelos de superficie del terreno para la estimación de flujos de calor y humedad en la capa superficial (Jiménez, 2016). A diferencia de superficies sólidas, donde el cálculo de los flujos de energía es realizado por los modelos de superficie del terreno, en superficies líquidas el esquema de capa superficial es quien hace el cálculo de los flujos y campos de diagnóstico (Skamarock et al., 2008). Como los esquemas de capa superficial ofrecen la información de estabilidad para su uso en los esquemas de superficie del terreno y capa límite planetaria, cada opción de capa superficial está vinculada a un esquema de PBL (Vara-Vela, 2013). El esquema de capa superficial empleado en este estudio corresponde a la Teoría de Similaridad (MM5), el cual utiliza funciones de estabilidad propuestos por Paulson (1970), Dyer y Hicks (1970), y Webb (1970) para calcular los coeficientes de intercambio de calor, humedad y cantidad de movimiento; además, es compatible con los esquemas de PBL evaluados (YSU y ACM2).

En los esquemas de superficie del terreno se calculan los flujos de calor y humedad que proveen la condición de frontera inferior para el transporte vertical desarrollado en los esquemas de PBL (Skamarock et al., 2008). Este cálculo se realiza a partir de la información proveniente del esquema de capa superficial, el forzamiento radiativo del esquema de radiación y el volumen de precipitación proveniente de los esquemas de microfísica y convección, conjuntamente con información de estado

del terreno (por ejemplo temperatura de superficie y del suelo, perfiles de humedad, cobertura de nieve, entre otros) y propiedades de la superficie terrestre (Jiménez, 2016). El esquema utilizado en este estudio corresponde al modelo Noah-LSM, desarrollado en conjunto por NCAR y NCEP y útil en estudios de investigación y pronóstico. Este es un modelo de 4 capas de temperatura y humedad del suelo con previsión de la cobertura de nieve. Incluye zonas con raíces, evapotranspiración, drenaje del suelo y escorrentía superficial, teniendo en cuenta además varias categorías de vegetación, fracción mensual de vegetación y textura del suelo. El modelo provee flujos de calor sensible y latente al esquema de PBL (Arellano, 2013).

### 3.2.3. DATOS DE EMISIONES EN WRF-CHEM

La incorporación de información de emisiones para las simulaciones con el componente químico activado es uno de los aspectos fundamentales en WRF-Chem, y la principal diferencia con respecto a la modelización meteorológica con WRF (Peckham et al., 2015a). Esta información de entrada puede ser incluida en diferentes etapas de la simulación como se muestra en la Figura 3.2. Por ejemplo, los campos de emisión de polvo se incluyen en el WPS mientras que emisiones antropogénicas (provenientes de modelos globales o emisiones locales) se leen durante la ejecución del ARW solver. De forma general, Peckham et al. (2015a) sugieren que la generación de información de entrada con campos de emisión para las simulaciones es un procedimiento sumamente complejo, además de ser determinante para obtener resultados realistas de los procesos que gobiernan la química de la atmósfera y el transporte de contaminantes del aire.

Diferentes herramientas son descritas en uno de los manuales de usuario del modelo, con el fin de incluir flujos de emisión en simulaciones con WRF-Chem (Peckham et al., 2015b). Estos programas son diseñados para incluir información de emisiones provenientes de inventarios específicos y en algunos casos aplicables solo a ciertas regiones del planeta (como el Inventario Nacional de Emisiones de Estados Unidos, NEI). Algunos ejemplos se muestran en la Tabla 3.2. Se observa como las herramientas disponibles para emisiones antropogénicas en Suramérica, son en su mayoría aplicadas a inventarios globales. Por tal motivo, en el caso concreto de simulaciones con información de flujos de emisión de un inventario local, el usuario debe crear o modificar códigos en el modelo para incluir adecuadamente los campos de emisión, tarea que no es trivial y que explica en parte las dificultades en la utilización de este tipo de modelos de transporte químico para estudiar los fenómenos de contaminación atmosférica, especialmente en zonas con alta influencia de sus dinámicas de emisión locales.

**Tabla 3.2. Algunas herramientas disponibles para incluir flujos de emisión en las rutinas de simulación de WRF-Chem (Peckham et al., 2015b).**

Herramienta	Tipo de emisión que tiene en cuenta	Región de aplicación	Observaciones adicionales
emiss_v03	- Antropogénicas: Inventario Nacional de Emisiones de Estados Unidos (NEI por sus siglas en inglés). Desarrollado por la EPA para el año 2005 con una resolución de 4 km.	Estados Unidos, sur de Canadá y norte de México	Requiere correr además el programa <i>convert_emiss</i> para generar los archivos con la información de entrada
prep_chem_sources <sup>a</sup>	- Antropogénicas: inventarios globales RETRO, EDGAR y EDGAR-HTAP - Biogénicas (inventarios GEIA y MEGAN) - Quema de biomasa - Campos background de GOCART	Global, según dominio de simulación	

Herramienta	Tipo de emisión que tiene en cuenta	Región de aplicación	Observaciones adicionales
	- Emisiones volcánicas (para desgasificación de SO <sub>2</sub> , información hasta el 2007).		
anthro_emis <sup>b</sup>	- Antropogénicas: a partir de inventarios globales como el EDGAR-HTAP	Global, según dominio de simulación	
bio_emiss <sup>b</sup>	- Biogénicas: a partir del modelo MEGAN versión 2.04 (Guenther et al., 2006)	Global, según dominio de simulación	El preprocesador genera los archivos de entrada necesarios para que durante la simulación con WRF-Chem se calculen las emisiones de VOC, NO <sub>x</sub> y CO por fuentes biogénicas (vegetación)

<sup>a</sup> Mayor información puede consultarse en Freitas et al., 2011.

<sup>b</sup> Mayor información puede consultarse en <https://www2.acom.ucar.edu/wrf-chem/wrf-chem-tools-community>.

### **La herramienta Another Assimilation System for WRF-Chem (AAS4WRF)**

Como se mencionó anteriormente, el modelo WRF-Chem no tiene dentro de sus herramientas disponibles en el manual de usuario un programa que permita incluir flujos de emisión provenientes de inventarios locales para una región específica. Sin embargo, diferentes grupos de investigación han desarrollado sus propias metodologías y programas para poder realizar simulaciones con emisiones locales. Un ejemplo es el preprocesador de emisiones: Another Assimilation System for WRF-Chem (AAS4WRF) (Vara-Vela et al., 2011, 2016; Muñoz et al., 2010, 2012), desarrollado por integrantes del Observatorio Latinoamericano de Eventos Extraordinarios (OLE2). Esta herramienta, escrita en lenguaje NCL (NCAR Command Language), fue diseñada para generar archivos de entrada con flujos de emisión locales para su uso en WRF-Chem, a partir de información de emisiones de una región específica. Las emisiones locales deben estar distribuidas en celdas bidimensionales con proyección geográfica latitud-longitud. AAS4WRF escala dichas emisiones a las coordenadas curvilíneas de WRF-Chem, tanto en superficie como para diferentes niveles verticales según sea el caso. Además, permite generar flujos de emisión según la desagregación temporal del inventario de emisión local (por ejemplo datos horarios). Una característica importante de esta herramienta tiene que ver con el uso de una función que escala las emisiones locales sobre el punto de grilla más cercano (*nearest neighbor*) en el dominio de simulación, lo que garantiza la conservación de la masa. El preprocesador es mantenido actualmente por Ángel Vara-Vera y está disponible de forma gratuita para los usuarios del modelo, previa solicitud al correo electrónico: [angel.vela@iag.usp.br](mailto:angel.vela@iag.usp.br).

### **3.2.4. IMPORTANCIA DEL MECANISMO QUÍMICO Y SU RELACIÓN CON LA INFORMACIÓN DE EMISIONES A UTILIZAR**

Otro aspecto importante no solo en los procedimientos de generación de campos de emisión sino también en las simulaciones numéricas, es el mecanismo químico a emplear (Gavidia, 2015). Éste determina las especies y reacciones que representarán matemáticamente los procesos asociados a la química de la fase gaseosa y la dinámica de aerosoles. Por ejemplo, uno de los mecanismos químicos en fase gaseosa ampliamente utilizados en modelización atmosférica para previsión de oxidantes fotoquímicos y otros contaminantes es el RADM2 (The second generation Regional Acid Deposition Model) (Stockwell et al., 1990). En el grupo de especies inorgánicas, RADM2 considera 14 especies estables, 4 reactivas intermedias y 3 especies estables abundantes (oxígeno, nitrógeno y vapor de agua). La química orgánica es representada por 26 especies estables y 16 radicales peroxy. Las

características específicas de las reacciones químicas y especies involucradas en el mecanismo pueden consultarse en Stockwell et al. (1990). Según Vara-Vela (2013) y Arellano (2013), RADM2 es un compromiso entre detalles químicos, precisión en la previsión química y recursos computacionales disponibles. El mecanismo RADM2 fue utilizado en la presente investigación, en la sección de resultados se discuten detalles adicionales sobre su selección.

En el caso de incluir emisiones aplicando alguna de las herramientas descritas en la Tabla 3.2, el usuario debe asegurarse de que la herramienta esté diseñada para generar las especies propias del mecanismo que se va seleccionar en la simulación. No todos los mecanismos disponibles en WRF-Chem están habilitados en estos programas, por ejemplo, la herramienta `prep_chem_sources` genera emisiones para los mecanismos RADM2, RACM y CB07. Lo mismo sucede con la herramienta AAS4WRF, en la cual el usuario es quien debe generar la especiación química del inventario de emisión local, para que sea concordante con las especies del mecanismo químico que utilizará en la simulación.

### 3.2.5. CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO PARA ESPECIES QUÍMICAS EN WRF-CHEM

La simulación numérica con modelos de pronóstico, tanto meteorológicos como de transporte químico, puede ser vista como un problema de condiciones iniciales (IC) y de contorno (BC) (Lin, 2007, citado por Gavidia, 2015). Esta definición aplica para simulaciones en las que se establece un área limitada (por ejemplo regional o local), siendo las IC especificadas al inicio de la simulación, mientras que las BC se especifican durante todo el periodo en intervalos de tiempo específicos.

Gavidia (2015) describe posibles métodos para minimizar el impacto de las IC y BC en las simulaciones numéricas con CTM. En el caso de las IC, la práctica común es utilizar tiempos adecuados de spin-up según el periodo de simulación, debido a que el efecto de la condición inicial disminuye exponencialmente con el tiempo. De otra parte, el método más común para reducir impactos asociados a las BC químicas, es la utilización de salidas de modelos de una escala mayor (por ejemplo un modelo global), para generar las BC de los dominios de menor tamaño. La utilización de modelos globales para este propósito puede garantizar la generación de BC dinámicas en las que se puede tener una variación temporal y espacial para especies químicas diversas.

En el modelo WRF-Chem existen varios métodos para definir las BC en simulaciones para casos reales, todos especificados a través del `namelist.input`. Una primera opción es la utilización de BC estáticas (sin variación en tiempo y espacio) a partir de un perfil idealizado. Este perfil es obtenido del modelo químico NALROM en simulaciones realizadas para el hemisferio norte (latitudes medias) y en ambientes limpios. Otra opción es la utilización de BC dinámicas con información proveniente de modelos globales. Para llevar a cabo este propósito, WRF-Chem dispone de dos herramientas denominadas `wrfchembc`, que permite generar BC a partir de información de los modelos globales MPI-MATCH y RAQMS; y la herramienta `mozbc`, que emplea información proveniente de los modelos globales MOZART-4 y CAM-Chem (Gavidia, 2015). En las simulaciones realizadas para Manizales, se optó por emplear la herramienta `mozbc` para generar BC químicas con información del modelo global MOZART-4. Esta selección se realizó con base en los resultados reportados por Gavidia (2015), quien comparó la influencia de las BC estáticas (perfil idealizado) y dinámicas (a partir del modelo MOZART-4) en simulaciones sobre la región metropolitana de Sao Paulo, Brasil. Los resultados obtenidos en dicho estudio, permitieron concluir que con el uso de las BC dinámicas se obtuvo representación más consistente de las concentraciones de fondo de los contaminantes O<sub>3</sub>, CO y NO<sub>x</sub>, destacando además la gran influencia que tienen las BC en la representación de las concentraciones de fondo principalmente para el ozono troposférico.

### 3.3. ASPECTOS METODOLÓGICOS GENERALES PARA LA SIMULACIÓN DE CALIDAD DEL AIRE EN MANIZALES

Esta sección presenta de forma general la metodología llevada a cabo para la modelización de calidad del aire en la ciudad de Manizales utilizando el modelo WRF-Chem. Teniendo en cuenta que parte de los resultados obtenidos comprendieron la elaboración de un manuscrito en el cual se incluye información metodológica específica de las simulaciones, esta sección pretende incluir los aspectos metodológicos generales con información adicional relevante no incluida en el artículo. En la sección 3.4.2 el lector podrá consultar el manuscrito elaborado y su sección “materials and methods” donde se detalla la metodología de la modelización numérica realizada en Manizales.

#### 3.3.1. DISEÑO DE LAS SIMULACIONES

Las simulaciones fueron realizadas durante un periodo seco de una semana, junio 28 a julio 5 del 2015. Como se expuso en el capítulo 1, se planteó la realización de la modelización en un periodo seco al ser este el primer ejercicio de simulación atmosférica y de calidad del aire sobre la ciudad de Manizales. Inicialmente es importante consolidar el modelo para un periodo seco, ya que las simulaciones para periodos con presencia de lluvia tienen una mayor dificultad en la modelización de variables como la altura de capa límite y la precipitación. Por ejemplo, la investigación doctoral de Jiménez (2016), planteó el uso del modelo WRF para el estudio de la altura de la capa de mezcla únicamente durante época seca en la Región Metropolitana del Valle de Aburrá, Colombia. Dicho autor destaca las complejidades inherentes en el estudio de la capa límite en época de lluvias y en regiones de terreno complejo, dada su alta variabilidad espacial y temporal. En lo que respecta a la precipitación, diversos estudios destacan que ésta es una de las variables más complejas para efectos de simulación y pronóstico con modelos numéricos (Liu et al., 2012; Tian et al., 2017). En términos de calidad del aire, las condiciones de tiempo seco pueden garantizar una mayor influencia de la radiación solar incidente y mayores temperaturas, generando condiciones favorables para la formación de contaminantes como el ozono troposférico (Arellano, 2013).

Teniendo en cuenta estas consideraciones, la escogencia del periodo de simulación se basó en los registros de las estaciones meteorológicas de la ciudad (días sin presencia de lluvia) y la disponibilidad de datos observados de variables de calidad del aire y meteorología, que permitan la comparación con los resultados de las simulaciones. La Figura 3.4 muestra los registros de precipitación total diaria reportados por la estación meteorológica Hospital (ver ubicación de la estación en la Figura 3.7), a partir de los cuales se seleccionó el periodo simulado (junio 28 a julio 5 del 2015). Se observa como durante este periodo se presentaron condiciones de tiempo seco. Sumado a esto, las concentraciones de los contaminantes analizados durante este periodo no presentaron datos atípicos ni vacíos de información, tal como se expone en la sección 3.4.1.

Además de las consideraciones descritas, es importante resaltar que la selección de un periodo de simulación de una semana fue necesario debido a que factores como el reducido tamaño del área urbana de la ciudad ( $\sim 54\text{km}^2$ ), hacen necesario el uso de varios dominios en la simulación y una resolución alta (cuatro dominios anidados con resolución máxima de 1 km). Estas características, sumadas a la inclusión de la química en la simulación numérica, incrementan los tiempos de simulación y generan un alto gasto computacional que se traduce en tiempos prolongados de simulación (por ejemplo, las simulaciones de una semana completa requirieron 48 h de simulación computacional). Esto es importante ya que la aplicación inicial del modelo de transporte químico sobre Manizales se basó en la realización de varios experimentos de simulación, que permitieran la

selección de una configuración del modelo adecuada para la región de estudio. Este procedimiento incluyó no solo el análisis de sensibilidad a las parametrizaciones físicas descrito en la sección 3.4.2, sino también diversas simulaciones para garantizar una óptima configuración de los dominios, evaluación de bases de datos de uso del suelo disponibles y otras configuraciones adicionales de parametrizaciones que fueron evaluadas y no se muestran en la presente investigación. La Tabla 3.3 resume de forma general los procedimientos llevados a cabo en este estudio para definir la configuración del modelo WRF-Chem en la simulación de calidad del aire.

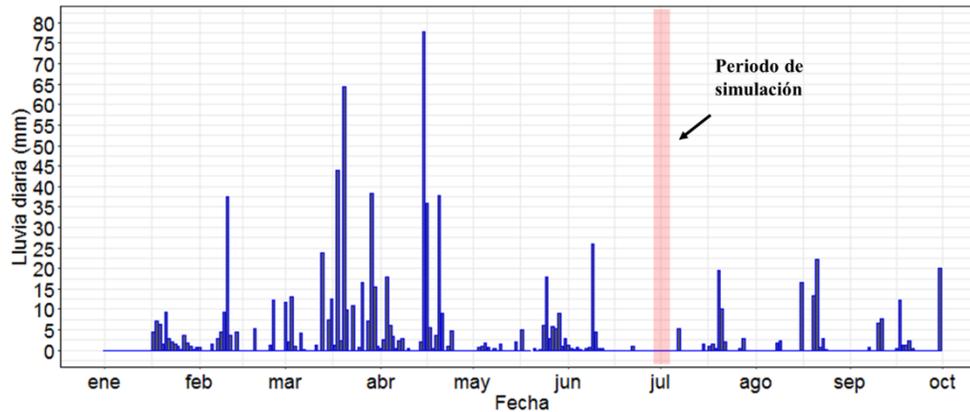


Figura 3.4. Precipitación diaria registrada en la estación meteorológica Hospital durante el año 2015.

Tabla 3.3. Resumen general de procedimientos llevados a cabo para definir la configuración del modelo WRF-Chem en la simulación de calidad del aire en Manizales.

Parámetro evaluado	Variaciones realizadas	Consideraciones sobre resultados obtenidos
Configuración de dominios de simulación	- Posición geográfica del dominio de mayor resolución. - Relación de tamaño entre dominio padre (menor resolución) y los dominios de menor tamaño (mayor resolución). Se evaluaron relaciones entre dominios de 1-3-3-3 (dominio padre de 27 km) y 1-5-5 (dominio padre de 25 km).	- Con respecto a la posición geográfica, algunas simulaciones presentaron problemas de inestabilidad numérica debido a las variaciones de topografía. - Mejores resultados se obtuvieron con relaciones de tamaño 1-3-3-3.
Base de datos de uso del suelo	- Datos estáticos de uso de suelo a partir de imágenes MODIS y USGS.	La selección se basó en los reportes de Arango (2014), utilizando datos MODIS para simulaciones con WRF en el Valle de Sogamoso, Colombia. Se realizaron pruebas adicionales con datos USGS sin obtener mejoras en los resultados.
Esquemas físicos	- Análisis de sensibilidad mediante evaluación de 6 configuraciones de esquemas físicos en el modelo WRF-Chem. La selección de las configuraciones evaluadas se basó en reportes de otros estudios en Colombia y Suramérica.	Resultados sobre el análisis de sensibilidad para las 3 configuraciones principales se muestran en la sección 3.4.2.

A pesar de que el periodo simulado se podría considerar como un espacio temporal corto, los resultados obtenidos, tanto en la configuración del modelo como en términos de la dinámica de los contaminantes del aire, son de importancia para que en futuras investigaciones se implementen simulaciones para periodos más extensos, que permitan ahondar aún más en el estudio del comportamiento típico de la meteorología y la calidad del aire en la región.

La modelización numérica se realizó en tres etapas:

- Diseño de dominios de simulación y análisis de sensibilidad inicial para definir las parametrizaciones físicas que permitan la mejor representación de la meteorología (temperatura, humedad relativa y vientos) y la química (en términos de  $O_3$ ).
- Modelización de calidad del aire incluyendo fuentes de emisión antropogénicas (móviles en ruta y estacionarias puntuales), analizando los resultados obtenidos en términos de  $O_3$  y  $PM_{10}$ . En esta etapa se realizó además un análisis comparativo en los resultados del modelo para los contaminantes mencionados, al utilizar inventarios de emisión globales y el inventario local.
- Modelización de calidad del aire enfocada en los resultados para  $SO_2$  incluyendo fuentes de emisión antropogénicas (móviles en ruta y estacionarias puntuales) y volcánicas (desgasificación de  $SO_2$ ). El objetivo principal de esta etapa fue analizar la influencia de dichas fuentes de emisión sobre los niveles de inmisión de  $SO_2$  en la ciudad.

Detalles metodológicos y resultados sobre el análisis de sensibilidad y el análisis de la modelización de calidad del aire para de  $O_3$  y  $PM_{10}$ , se presentan en la sección 3.4.2. Los resultados asociados a concentraciones de  $SO_2$  se muestran en la sección 3.4.3.

El diseño general de las simulaciones se basó en una configuración de 4 dominios anidados (ver detalles en la sección 3.4.2: materials and methods, Table 1 y Figure 1). En los dominios de menor resolución, D1 (27 km) y D2 (9 km), las simulaciones se realizaron sin activación de la química y mediante un anidamiento en dos vías (two-way nesting). A partir del dominio D3, se activó la química utilizando el mecanismo químico RADM2/MADE-SORGAM (opción 106 empleando el preprocesador cinético KPP). En los dominios con química activada (D3 y D4) las simulaciones se realizaron con anidamiento en una dirección (one-way nesting), en el cual no existe un *feedback* entre dominios. Esta metodología de simulación se basó en los trabajos de Vara-Vela (2013; 2016) y Arellano (2013), quienes exponen las siguientes consideraciones sobre su diseño:

- Las simulaciones con anidamiento en una dirección para modelización con química activada permiten la eliminación de posibles errores de conservación de masa. En las simulaciones a nivel de mesoescala, la limitada extensión de los dominios genera procesos de entrada y salida entre dominios que pueden variar entre unos pocos días a algunas semanas. De otra parte, los aerosoles y especies químicas de gases traza tienen tiempos de vida típicos de algunos días o menos. Este hecho implica que en la escala de simulación de interés, las escalas de tiempo de especies contaminantes son menores durante los procesos de transporte, transformación y remoción, que las escalas de tiempo del error de conservación de masa en el modelo. A este aspecto se suma la no linealidad de la evolución de especies químicas que puede contribuir a inconsistencias cuando se utilizan dominios anidados con interacción en dos vías (Arellano, 2013).
- Cuando se dispone de recursos computacionales limitados, no es recomendable realizar simulaciones con química activada en anidamiento en dos vías debido al alto gasto computacional que este método requiere (Vara-Vela, 2013).

Un aspecto importante en las simulaciones para los dominios de menor resolución en los cuales se activó la química, D3 (3 km) y D4 (1 km), tiene que ver con el tipo de emisiones utilizadas y la generación de condiciones de borde (BC). Para el dominio D3, la simulación se realizó mediante la generación de BC a partir de la herramienta *mozbc*, con la cual es posible generar condiciones de borde para especies químicas en intervalos de 6 horas con información del modelo global MOZART-4. Las salidas del dominio D3 se utilizaron para generar las IC y BC del dominio de mayor resolución

(D4). Como se programó el modelo para generar salidas horarias en D3, fue posible generar BC horarias en D4. Finalmente en el dominio objeto de estudio (D4) se incluyeron los campos de emisiones antropogénicas y volcánicas, y se activaron las emisiones biogénicas de MEGAN.

### ***Consideraciones sobre la inclusión de flujos de emisión locales provenientes de fuentes antropogénicas y del volcán Nevado del Ruiz***

El preprocesador AAS4WRF fue utilizado en este estudio para incluir las emisiones del inventario local y flujos de emisión de SO<sub>2</sub> provenientes del volcán Nevado del Ruiz. En la Tabla 3.4 se muestra un resumen general de las consideraciones tenidas en cuenta para incluir las emisiones locales en el modelo WRF-Chem.

Como se indicó en la sección 3.2.3, para el uso de la herramienta AAS4WRF se requiere que el usuario genere la especiación química del inventario, y esta debe ser concordante con las especies del mecanismo químico que utilizará en la simulación. Este es un tema crítico especialmente para el grupo de compuestos orgánicos volátiles diferentes al metano (NMVOC), en el cual pueden existir una gran variedad de especies, que difieren para cada mecanismo químico según su complejidad y la formulación de sus ecuaciones en el mecanismo de reacción. Sumado a esto, es necesario definir la composición másica del material particulado en términos del contenido de carbono orgánico, carbono elemental, sulfatos, nitratos, entre otros.

**Tabla 3.4. Consideraciones para incluir las emisiones locales y volcánicas en las simulaciones.**

<b>Tipo de emisión</b>	<b>Fuente de datos y resolución</b>	<b>Nivel vertical de entrada en el modelo</b>	<b>Observaciones adicionales</b>
Antropogénica: - Fuentes móviles en ruta - Fuentes estacionarias puntuales	- Inventario de emisión local (ver detalles en el capítulo 2). - Resolución espacial de 1km x 1km y emisiones horarias	Emisiones incluidas en el primer nivel (superficie) <sup>a</sup>	Los contaminantes criterio, GHG, especiación de NMVOC y composición másica del PM <sub>10</sub> fueron asociados al mecanismo químico RADM2
Volcánica: - Desgasificación de SO <sub>2</sub> del volcán Nevado del Ruiz	- Emisiones horarias de SO <sub>2</sub> <sup>b</sup>	Distribución de la emisión: 75% a los 600 m (altura de la pluma) y 25% en niveles verticales inferiores	Se tomó como altura máxima de emisión la altitud media de la pluma volcánica registrada en el mes de julio de 2015 <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Se incluyeron todas las emisiones antropogénicas en superficie teniendo en cuenta que la altura del primer nivel vertical en WRF-Chem es de 57 m y las alturas de chimenea de fuentes estacionarias no sobrepasan los 30 m.

<sup>b</sup> Datos de emisión suministrados por el Servicio Geológico Colombiano de Manizales. Mayor información sobre las técnicas de medición de flujos de emisión y datos de altura media de la pluma volcánica se pueden consultar en SGC (2015).

### **Emisiones antropogénicas**

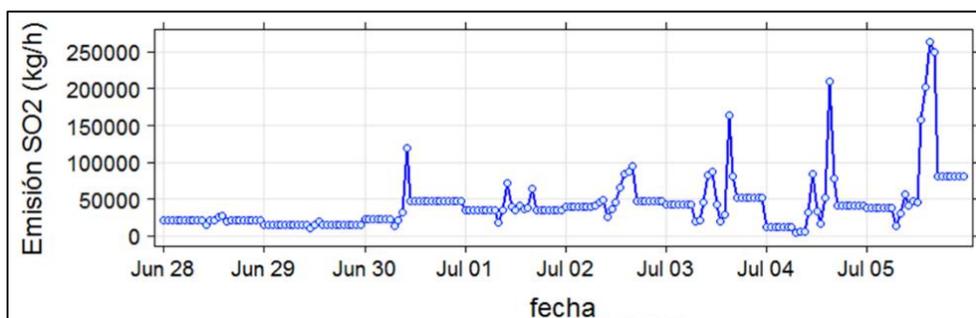
En el caso de las emisiones antropogénicas, provenientes del inventario de emisión local desagregado en tiempo y espacio (ver capítulo 2), se tienen flujos de emisión para contaminantes criterio, GHG y NMVOC. Este último contaminante fue estimado como NMVOC totales, es decir, sin tener en cuenta su especiación. Por lo tanto, fue necesario estimar la distribución de las especies químicas para los NMVOC de acuerdo al mecanismo químico RADM2 (seleccionado para las simulaciones).

Para fuentes estacionarias puntuales, se utilizaron las fracciones másicas reportadas en la base de datos de la EPA, Speciate Version 4.2 (<https://www.epa.gov/air-emissions-modeling/speciate-version-45-through-40>). De otra parte, para las emisiones por fuentes móviles en ruta que contribuyen al 99.9% de la emisión total de NMVOC en comparación con las fuentes estacionarias puntuales en Manizales, no se dispone de estudios en Colombia que determinen su especiación química. En esta emisión se pueden tener perfiles diferenciados para las emisiones por tubo de escape (que dependen del combustible utilizado) y para emisiones evaporativas principalmente por el uso de gasolina. Debido a la falta de información local para fuentes móviles en ruta, se optó por utilizar los porcentajes de distribución de especies químicas para NMVOC reportados por Vara-Vela (2013), obtenidos en pruebas de túnel en Sao Paulo, Brasil y compatibles con las especies del mecanismo químico RADM2 (Anexo F). En el caso de la composición másica del material particulado (PM<sub>10</sub>), se utilizó la información reportada en el estudio de Velasco (2015), quien realizó una caracterización del PM<sub>10</sub> en la ciudad de Manizales.

### Emisiones volcánicas

En el caso de las emisiones volcánicas, se incluyeron en el modelo los flujos de emisión de SO<sub>2</sub> del volcán Nevado del Ruiz según la información de emisiones suministrada por el Servicio Geológico Colombiano (SGC), a través del Observatorio Vulcanológico y Sismológico de Manizales (OVSM). El monitoreo de la emisión de SO<sub>2</sub> volcánica se realiza mediante un equipo telemétrico ScanDOAS (Differential Optical Absorption Spectroscopy), ubicado en la estación denominada Alfombrales. Debido a la técnica de medición del equipo (espectroscopía de absorción), se tienen datos de flujos de emisión durante horas con presencia de luz solar y en ausencia de alta nubosidad. Por lo tanto, para aquellas horas sin información de emisión se asumió un flujo constante basado en el promedio de las horas previas de emisión reportadas.

En la Figura 3.5 se muestra la distribución de emisiones horarias utilizada para la simulación con WRF-Chem. Mayor información sobre la red de monitoreo geoquímico del volcán Nevado del Ruiz puede consultarse en <http://www2.sgc.gov.co/Manizales.aspx>. Asimismo, información detallada sobre la actividad volcánica durante el mes de julio de 2015 puede consultarse en SGC (2015).

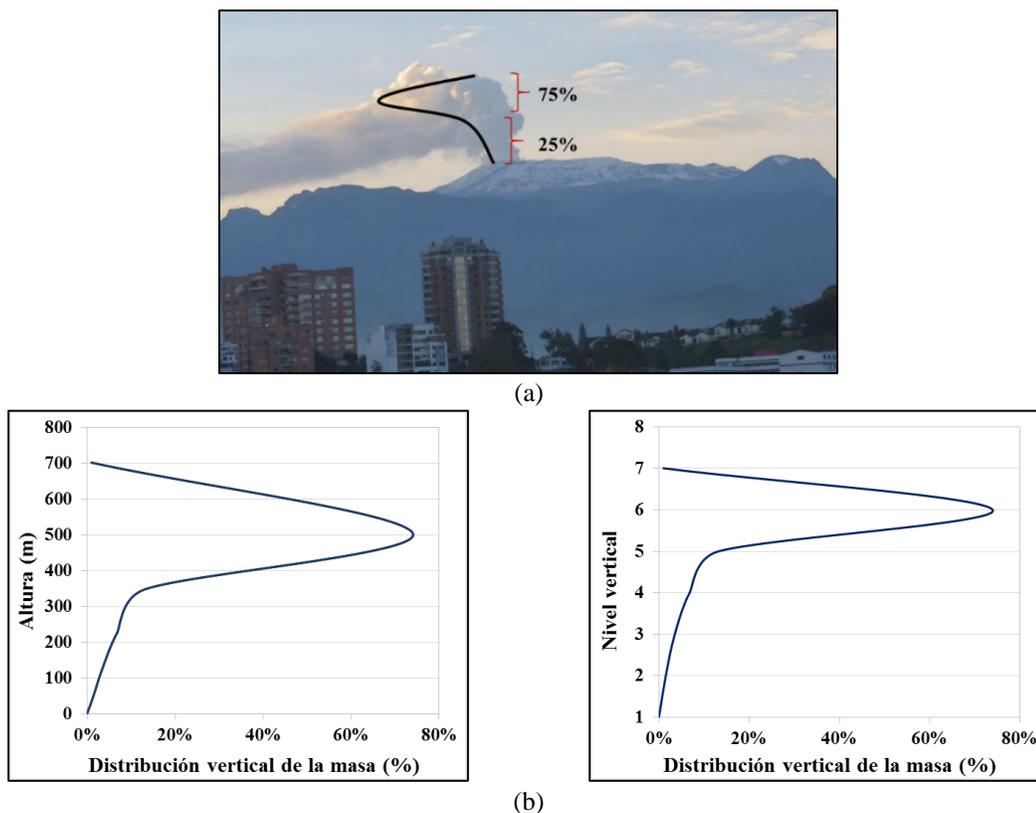


**Figura 3.5. Información de flujos horarios de emisión de SO<sub>2</sub> del volcán Nevado del Ruiz utilizados en la simulación con WRF-Chem.**

Como se mencionó previamente, las emisiones volcánicas de SO<sub>2</sub> fueron ingresadas al modelo mediante la herramienta AAS4WRF. Con el fin de tener una representación realista de la pluma de emisión volcánica, se asumió una distribución vertical de la masa en la pluma con base en el estudio de Stuefer et al. (2013). En dicho estudio, se utiliza una formación de la pluma tipo “sombrialla”, asumiendo que el 75% de la masa emitida penetra en la zona de la vertical donde se forma la sombrilla de la pluma, mientras que el 25% restante se distribuye de forma lineal en los niveles verticales inferiores hasta el punto de emisión en la superficie (cráter). En la Figura 3.6a se muestra

una representación del esquema de distribución de la masa asumido para representar la emisión volcánica.

Debido a que no se tienen registros horarios sobre la altura de la pluma volcánica, se utilizó como valor la altura media de la pluma de emisión reportada por el SGC (2015) para el mes de julio de 2015, con un valor de 600 m. Esta altura se utilizó para definir el nivel vertical donde se ingresa el 75% de la masa de emisión. En la Figura 3.6b se muestra la distribución porcentual de la emisión asumida para este trabajo, en función de la altura sobre la superficie en el punto de emisión y de los niveles verticales iniciales utilizados en WRF-Chem. Vale la pena destacar que el modelo WRF-Chem dispone de un preprocesador de emisiones volcánicas (Stuefer et al., 2013) incluido dentro de la herramienta `prep_chem_sources`. Estas emisiones son obtenidas del programa AEROCOM (Diehl et al., 2012 citado por Stuefer et al., 2013). Sin embargo, este preprocesador tiene datos de emisión volcánica de  $\text{SO}_2$  hasta el año 2009.



**Figura 3.6. Distribución de pluma de emisión volcánica para la simulación con WRF-Chem. a) Esquema utilizado para la distribución másica de la pluma. b) Distribución porcentual de la emisión según los niveles verticales en el dominio de simulación (derecha) y la altura de cada nivel vertical sobre el punto de emisión (izquierda). Fotografía del volcán Nevado del Ruiz tomada de <http://www2.sgc.gov.co/Manizales/Volcanes/Nevado-del-ruiz/Galeria-de-fotos.aspx>**

### 3.3.2. MONITOREO Y OBTENCIÓN DE INFORMACIÓN DE CONTAMINANTES DEL AIRE Y VARIABLES METEOROLÓGICAS EN MANIZALES

Los resultados de las simulaciones numéricas fueron analizados y comparados con observaciones de variables meteorológicas y de contaminantes del aire en Manizales. En el caso del monitoreo de variables meteorológicas, se seleccionaron tres estaciones distribuidas en la zona occidental, centro

geográfico y zona oriental del área urbana de Manizales. Las estaciones ubicadas al oeste y centro de la ciudad (SGC y HOSPITAL) hacen parte de la red de estaciones meteorológicas de Manizales (<http://idea.manizales.unal.edu.co/index.php/estado-tiempo-manizales>), en la cual se realiza medición de las variables: temperatura, humedad relativa, vientos (dirección y velocidad), precipitación, presión barométrica y radiación solar. La información meteorológica, obtenida cada 5 minutos, puede ser consultada en el Centro de Datos e Indicadores Ambientales de Caldas – CDIAC (<http://cdiac.manizales.unal.edu.co/>). En la zona o de la ciudad se utilizó la información de la estación meteorológica ubicada en el aeropuerto La Nubia (estación NUBIA), cuyos datos fueron descargados del sistema ASOS (Automated Surface Observing System - <https://mesonet.agron.iastate.edu/>), de donde se obtuvo información de las variables temperatura, humedad relativa y vientos.

En el caso del monitoreo de contaminantes del aire, se obtuvo información de los contaminantes  $PM_{10}$ ,  $O_3$  y  $SO_2$ . La ciudad de Manizales cuenta con una red de monitoreo de material particulado con 5 estaciones para el seguimiento de  $PM_{10}$ . El monitoreo se realiza cada tres días y se reportan concentraciones promedio diarias. Previo al inicio de la presente investigación, la ciudad no contaba con registros continuos de otros contaminantes de interés como el  $O_3$  y  $SO_2$ . Como parte de este trabajo, se realizó el montaje de una estación de monitoreo automática (ver Ficha de Campo No. 1) que permitió el monitoreo continuo (datos horarios) de  $O_3$  y  $SO_2$  en un punto ubicado en el centro histórico de la ciudad (estación Gobernación). Actualmente la estación automática para el monitoreo de gases hace parte de la red de monitoreo de calidad del aire de Manizales, gracias al trabajo conjunto entre la Corporación Ambiental (CORPOCALDAS) y el grupo de investigación GTAIHA de la Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales. Las Fichas de Campo 1 a 5 muestran los detalles de las estaciones de calidad del aire en Manizales.

La ubicación de las estaciones meteorológicas y de calidad del aire utilizadas en este estudio se muestra en la Figura 3.7, donde se incluyen además las rosas de vientos obtenidas durante el año 2015 diferenciadas en periodo día (day-time) y noche (night-time). El comportamiento de los vientos en la ciudad se caracteriza por bajas velocidades del viento especialmente hacia el centro y el occidente de Manizales, con predominancia de velocidades de viento menores a 2 m/s. Hacia el oriente (estación NUB), las velocidades son un poco mayores con registros principalmente entre los 2 y 4 m/s. Asimismo, se observa como los vientos son influenciados por fenómenos orográficos registrando un perfil característico de movimientos valle-montaña, montaña-valle. Durante el día los vientos predominantes provienen del occidente, noroccidente y suroccidente, en dirección hacia las partes altas de la Cordillera Central. En la noche, este patrón se invierte, con vientos predominantes provenientes del oriente y suroriente, indicando el efecto del descenso de las masas de aire desde las partes más elevadas de la Cordillera Central.

### ***Monitoreo pasivo de $O_3$ , $SO_2$ y $NO_x$***

Como complemento al monitoreo activo de contaminantes del aire, una de las actividades relacionadas con la presente investigación consistió en apoyar la realización de tres campañas de monitoreo pasivo (PAS) para obtener información de los contaminantes  $O_3$ ,  $SO_2$  y  $NO_x$  en diferentes puntos del área urbana y rural del municipio de Manizales. La información obtenida en este estudio sirvió también para analizar los resultados de las simulaciones de calidad del aire. Mayores detalles sobre la metodología y resultados obtenidos en las campañas de monitoreo pasivo se muestran en el Anexo G, donde se incluye el manuscrito elaborado con los resultados de este monitoreo (artículo aceptado en la Revista Internacional de Contaminación Ambiental).

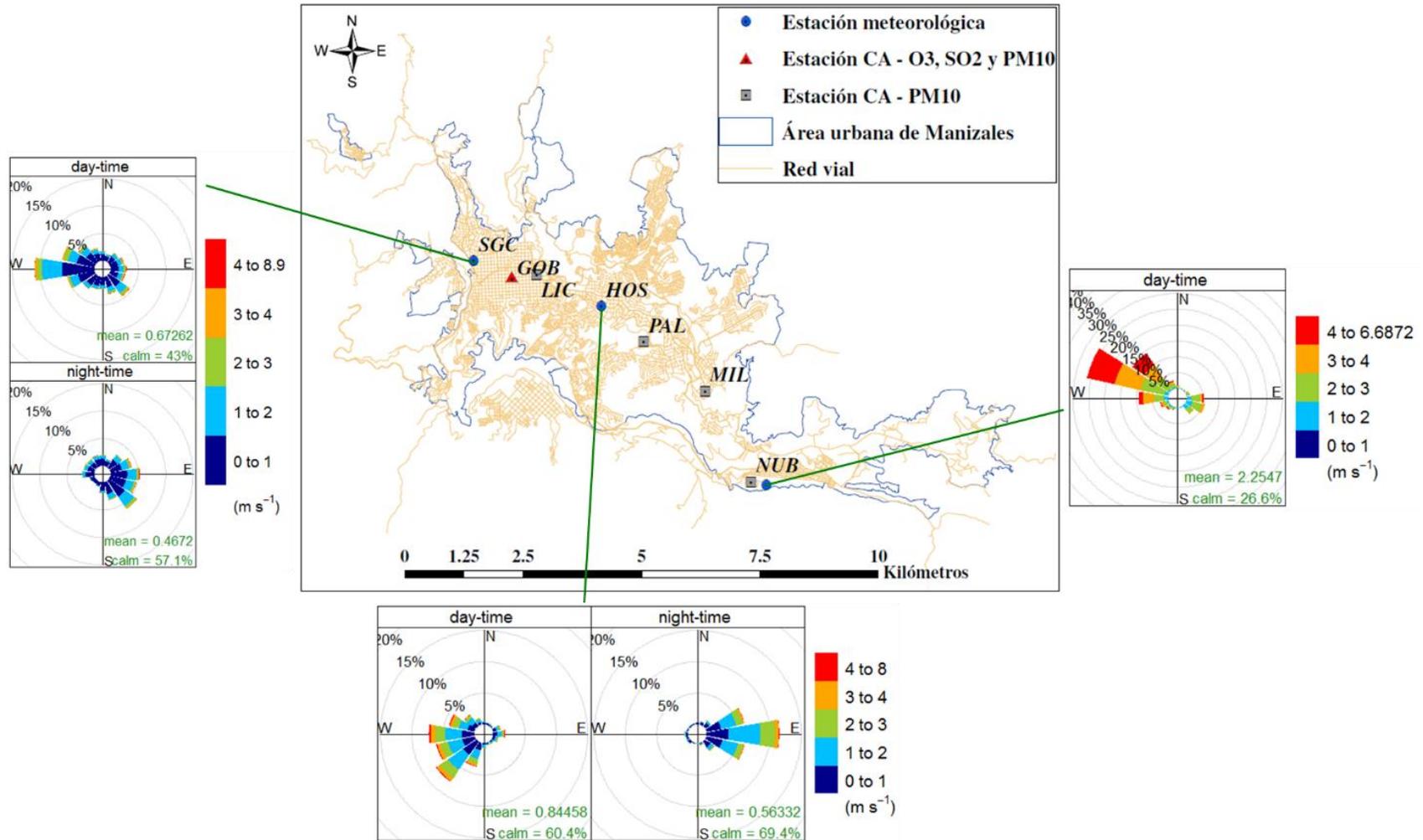


Figura 3.7. Ubicación de las estaciones meteorológicas y de calidad del aire (CA) empleadas en este estudio. Se muestran las rosas de viento obtenidas durante el año 2015 en las estaciones meteorológicas y diferenciadas en periodo día (day-time) y noche (night-time).

**Ficha de Campo No. 1. Estación de monitoreo de calidad del aire GOBERNACIÓN.**

<b>Nombre de la estación: GOBERNACIÓN (GOB)</b>	
<b>Ubicación (coordenadas geográficas):</b> N 5° 4' 6.8''    W 75° 31' 1.6''	<b>Contaminantes monitoreados:</b> - PM <sub>10</sub> , PM <sub>2.5</sub> *, O <sub>3</sub> , SO <sub>2</sub> *Equipo fuera de servicio.
<b>Altitud:</b> 2164 msnm	<b>Características de equipos de monitoreo:</b> - Equipo de bajo volumen para monitoreo de PM <sub>10</sub> marca Partisol-FRM modelo 2025. Flujo volumétrico de 16.7 L/min. - Equipos automáticos para monitoreo de gases marca Teledyne-API modelos T-400 (O <sub>3</sub> ) y T-100 (SO <sub>2</sub> )
<b>Fecha de instalación:</b> - Monitor PM <sub>10</sub> : 2009 - Monitor de gases: 2014	<b>Periodicidad de monitoreo:</b> - PM <sub>10</sub> : Monitoreo cada tres días. Reporte de concentración promedio diaria. - Gases: Monitoreo continuo cada 5 minutos. Reporte de concentración promedio horaria
<b>Características de ubicación:</b> - Zona centro histórico - Sector comercial	- <b>Influencia de tráfico vehicular:</b> Media - <b>Influencia de actividad industrial:</b> Baja
<b>Estación meteorológica asociada:</b> SGC	<b>Propietario:</b> Monitor de PM <sub>10</sub> : CORPOCALDAS Estación automática: Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales

**Registro Fotográfico**



Equipos de monitoreo.



Vista panorámica.

**Ficha de Campo No. 2. Estación de monitoreo de calidad del aire LICEO.**

<b>Nombre de la estación: LICEO (LIC)</b>	
<b>Ubicación (coordenadas geográficas):</b> N 5° 4' 7.7"      W 75° 30' 44.6"	<b>Contaminantes monitoreados:</b> - PM <sub>10</sub> , PST* *No utilizado en este estudio.
<b>Altitud:</b> 2161 msnm	<b>Características de equipos de monitoreo:</b> Equipo de alto volumen (Hi-Vol) para monitoreo de PM <sub>10</sub> marca Graseby Andersen, modelo 1200/VFC. Equipo volumétrico diseñado para mantener un flujo de 1130 L/min.
<b>Fecha de instalación:</b> - Monitor PM <sub>10</sub> : 2000	<b>Periodicidad de monitoreo:</b> Monitoreo cada tres días. Reporte de concentración promedio diaria.
<b>Características de ubicación:</b> - Zona centro histórico - Sector residencial-comercial	<b>- Influencia de tráfico vehicular:</b> Alta <b>- Influencia de actividad industrial:</b> Baja
<b>Estación meteorológica asociada:</b> HOSPITAL	<b>Propietario:</b> CORPOCALDAS
<b>Registro Fotográfico</b>	
 <p style="text-align: center;">Equipo de monitoreo.</p>	
 <p style="text-align: center;">Vista panorámica.</p>	

**Ficha de Campo No. 3. Estación de monitoreo de calidad del aire PALOGRANDE.**

<b>Nombre de la estación: PALOGRANDE (PAL)</b>	
<b>Ubicación (coordenadas geográficas):</b> N 5° 3' 22.4'' W 75° 29' 31.3''	<b>Contaminantes monitoreados:</b> - PM <sub>10</sub>
<b>Altitud:</b> 2154 msnm	<b>Características de equipos de monitoreo:</b> Equipo de alto volumen (Hi-Vol) para monitoreo de PM <sub>10</sub> marca Graseby Andersen, modelo 1200/VFC. Equipo volumétrico diseñado para mantener un flujo de 1130 L/min.
<b>Fecha de instalación:</b> - Monitor PM <sub>10</sub> : 2009	<b>Periodicidad de monitoreo:</b> Monitoreo cada tres días. Reporte de concentración promedio diaria.
<b>Características de ubicación:</b> - Zona centro geográfico - Sector residencial-comercial	<b>- Influencia de tráfico vehicular:</b> Media <b>- Influencia de actividad industrial:</b> Baja
<b>Estación meteorológica asociada:</b> PALOGRANDE	<b>Propietario:</b> Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales
<b>Registro Fotográfico</b>	
	
Equipo de monitoreo.	
	
Vista panorámica.	

**Ficha de Campo No. 4. Estación de monitoreo de calidad del aire MILÁN.**

<b>Nombre de la estación: MILÁN (MIL)</b>	
<p><b>Ubicación (coordenadas geográficas):</b> N 5° 2' 48.7'' W 75° 28' 49.3''</p>	<p><b>Contaminantes monitoreados:</b> - PM<sub>10</sub></p>
<p><b>Altitud:</b> 2190 msnm</p>	<p><b>Características de equipos de monitoreo:</b> Equipo de alto volumen (Hi-Vol) para monitoreo de PM<sub>10</sub> marca Graseby Andersen, modelo 1200/VFC. Equipo volumétrico diseñado para mantener un flujo de 1130 L/min.</p>
<p><b>Fecha de instalación:</b> - Monitor PM<sub>10</sub>: 2012</p>	<p><b>Periodicidad de monitoreo:</b> Monitoreo cada tres días. Reporte de concentración promedio diaria.</p>
<p><b>Características de ubicación:</b> - Zona nororiental - Sector residencial-industrial</p>	<p><b>- Influencia de tráfico vehicular:</b> Alta <b>- Influencia de actividad industrial:</b> Alta</p>
<p><b>Estación meteorológica asociada:</b> MILÁN-NIZA</p>	<p><b>Propietario:</b> CORPOCALDAS</p>
<b>Registro Fotográfico</b>	
	
<p>Equipo de monitoreo.</p>	
	
<p>Vista panorámica.</p>	

**Ficha de Campo No. 5. Estación de monitoreo de calidad del aire NUBIA.**

<b>Nombre de la estación: NUBIA (NUB)</b>	
<b>Ubicación (coordenadas geográficas):</b> N 5° 1' 47''    W 75° 28' 18''	<b>Contaminantes monitoreados:</b> - PM <sub>10</sub>
<b>Altitud:</b> 2091 msnm	<b>Características de equipos de monitoreo:</b> Equipo de alto volumen (Hi-Vol) para monitoreo de PM <sub>10</sub> marca Graseby Andersen, modelo 1200/VFC. Equipo volumétrico diseñado para mantener un flujo de 1130 L/min.
<b>Fecha de instalación:</b> - Monitor PM <sub>10</sub> : 2009	<b>Periodicidad de monitoreo:</b> Monitoreo cada tres días. Reporte de concentración promedio diaria.
<b>Características de ubicación:</b> - Zona oriental - Zona industrial	<b>- Influencia de tráfico vehicular:</b> Baja <b>- Influencia de actividad industrial:</b> Alta
<b>Estación meteorológica asociada:</b> NUBIA	<b>Propietario:</b> Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales
<b>Registro Fotográfico</b>	
	
Equipo de monitoreo.	
	
Vista panorámica.	

## 3.4. RESULTADOS

Los resultados presentados a continuación se dividen en tres componentes. En la sección 3.4.1 se muestran de forma general los resultados de concentraciones en aire ambiente medidas sobre el área urbana de Manizales durante el año 2015, para los contaminantes objeto de estudio:  $PM_{10}$ ,  $O_3$  y  $SO_2$ . Posteriormente, se muestran los resultados de las simulaciones realizadas con el modelo WRF-Chem. En la sección 3.4.2 se hace énfasis en los resultados para los contaminantes  $PM_{10}$ , y  $O_3$ , analizando la influencia de las fuentes antropogénicas. En la sección 3.4.3, se muestran los resultados obtenidos en la simulación del contaminante  $SO_2$ , discutiendo el efecto de emisiones antropogénicas y volcánicas sobre los niveles de este contaminante en Manizales.

### 3.4.1. CONCENTRACIONES DE $O_3$ , $SO_2$ Y $PM_{10}$ , EN EL AIRE AMBIENTE DE MANIZALES DURANTE EL AÑO 2015

Es importante conocer el comportamiento general de los contaminantes objeto de estudio sobre la ciudad, ya que la comparación de datos observados y simulados es la base para evaluar el desempeño del modelo de transporte químico y comprender la dinámica de transporte.

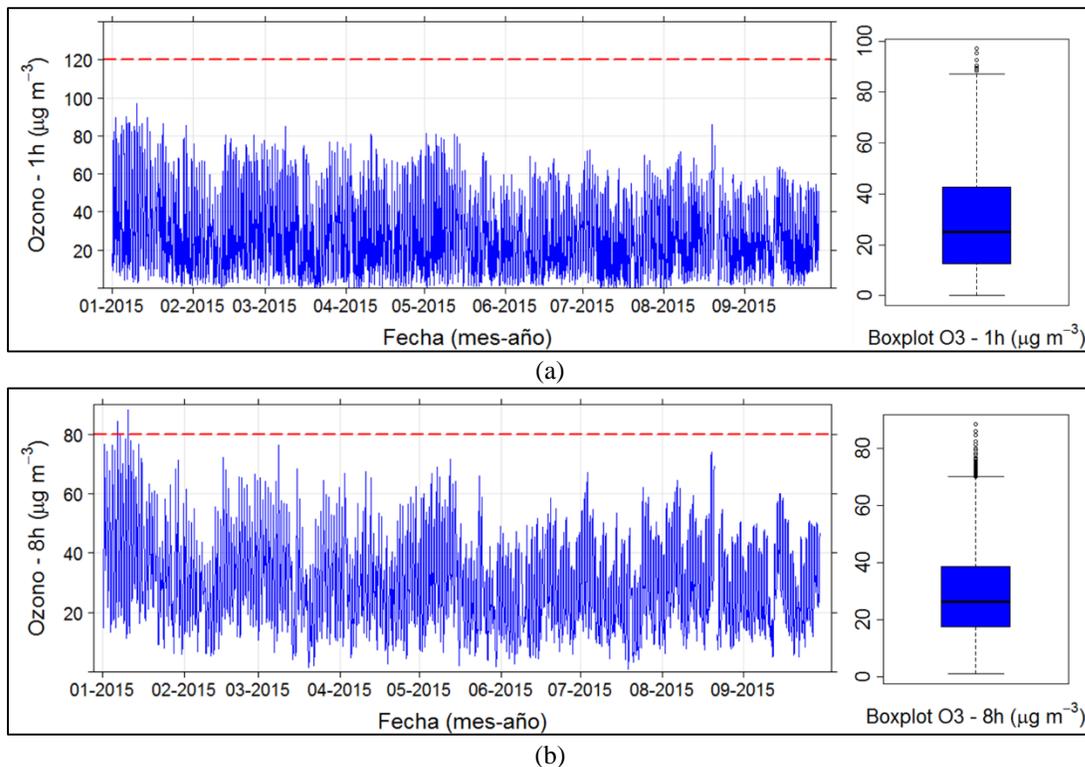
Para presentar los resultados de la red de monitoreo de calidad del aire de Manizales durante 2015, se emplearon unidades de concentración de  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  a condiciones estándar, tanto para gases como para  $PM_{10}$ . Esto con el fin de incluir además la comparación con los límites máximos permisibles para contaminantes criterio establecidos en la Resolución 610 de 2010 (MAVDT, 2010b). Teniendo en cuenta que los equipos de monitoreo de gases reportan las concentraciones en unidades de ppbv, se emplearon los siguientes factores de conversión:

- Para  $O_3$ :  $1 \text{ ppbv} = 1.96 \mu\text{g}/\text{m}^3$
- Para  $SO_2$ :  $1 \text{ ppbv} = 2.62 \mu\text{g}/\text{m}^3$

Se destaca además que para el monitoreo de los gases ( $O_3$  y  $SO_2$ ), se tuvieron registros durante el año 2015 entre los meses de enero y septiembre. A finales del mes de septiembre los equipos fueron llevados a mantenimiento preventivo, por lo tanto no se tuvo información para los últimos tres meses del 2015.

#### *Comportamiento de ozono troposférico ( $O_3$ )*

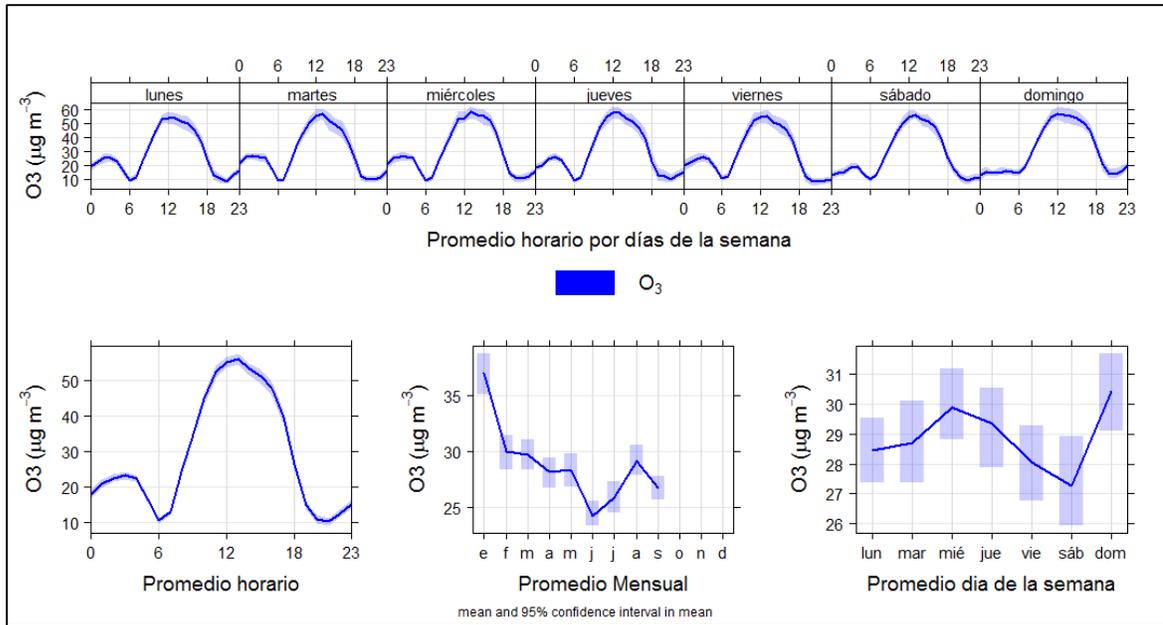
La variación temporal de las concentraciones horarias y octohorarias de  $O_3$  en la estación GOB durante el año 2015 se muestra en la Figura 3.8. La evolución de las concentraciones horarias (Figura 3.8a) presentó un promedio aritmético de  $28.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (desv.std. =  $19.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), con límites máximo y mínimo de 0 y  $97 \mu\text{g}/\text{m}^3$  respectivamente. Asimismo, en ningún momento se superó el límite máximo permisible colombiano para promedio horario establecido en  $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . En lo que respecta a los registros de ozono octohorario (Figura 3.8b), estimados a partir de la media móvil, se tuvieron dos excedencias a la norma durante el mes de enero de 2015. Los demás meses presentaron registros por debajo del límite normativo colombiano establecido en  $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .



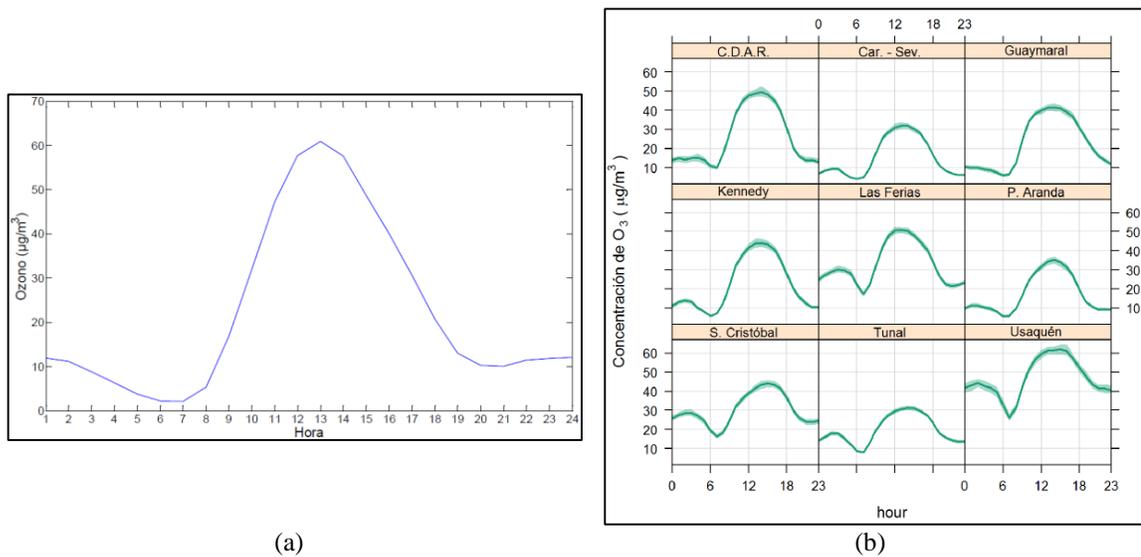
**Figura 3.8. Concentraciones de  $O_3$  obtenidas en la estación GOB durante el año 2015. a) Promedio horario. b) Promedio octohorario. Se muestran las series temporales de los datos (izquierda) y las gráficas de cajas y bigotes asociadas (derecha). La línea punteada roja indica el límite máximo permisible definido por la Resolución 610 de 2010 del MAVDT.**

Un resumen de la variación temporal del  $O_3$  en Manizales se puede observar en la Figura 3.9, donde se incluyen los resultados promedio del ciclo diurno horario, promedio mensual, promedio horario según los días de semana y promedio de cada día de la semana. En términos del ciclo diurno, los resultados muestran un perfil de  $O_3$  con las máximas concentraciones al medio día alrededor de  $56 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , un perfil característico de este tipo de contaminante secundario, el cual es generado por la acción de la luz solar a partir de reacciones fotoquímicas en presencia de precursores como VOC y  $\text{NO}_x$ . Los promedios horarios para cada día de la semana muestran un comportamiento uniforme, mientras que los promedios mensuales registraron a enero como el mes de máximo valor promedio de  $O_3$  ( $37 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). Durante este mes, se presentaron las únicas excedencias octohorarias del año.

Con el fin de tener un contexto nacional sobre los niveles de  $O_3$  en Manizales, el perfil diurno de  $O_3$  fue comparado con los reportes de las RVCA de las dos ciudades principales de Colombia para el año 2015, Medellín (AMVA, 2016) y Bogotá (SDA, 2016). En el caso de la ciudad de Medellín, la Figura 3.10 (izquierda) muestra el ciclo diurno reportado en la estación urbana de fondo “MED-UNNV”, en la cual se obtuvo un comportamiento similar al registrado en Manizales, con valores máximos al medio día cercanos a los  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . De otra parte, los resultados del perfil diurno de  $O_3$  obtenidos en Manizales fueron similares a los obtenidos en las estaciones “CDAR” (urbana de fondo) y “Las Ferias” (urbana de tráfico) de la ciudad de Bogotá (Figura 3.10, derecha).



**Figura 3.9. Variación temporal promedio de concentraciones de O<sub>3</sub> en Manizales durante 2015. El intervalo sombreado indica el intervalo de confianza del 95% sobre el promedio.**

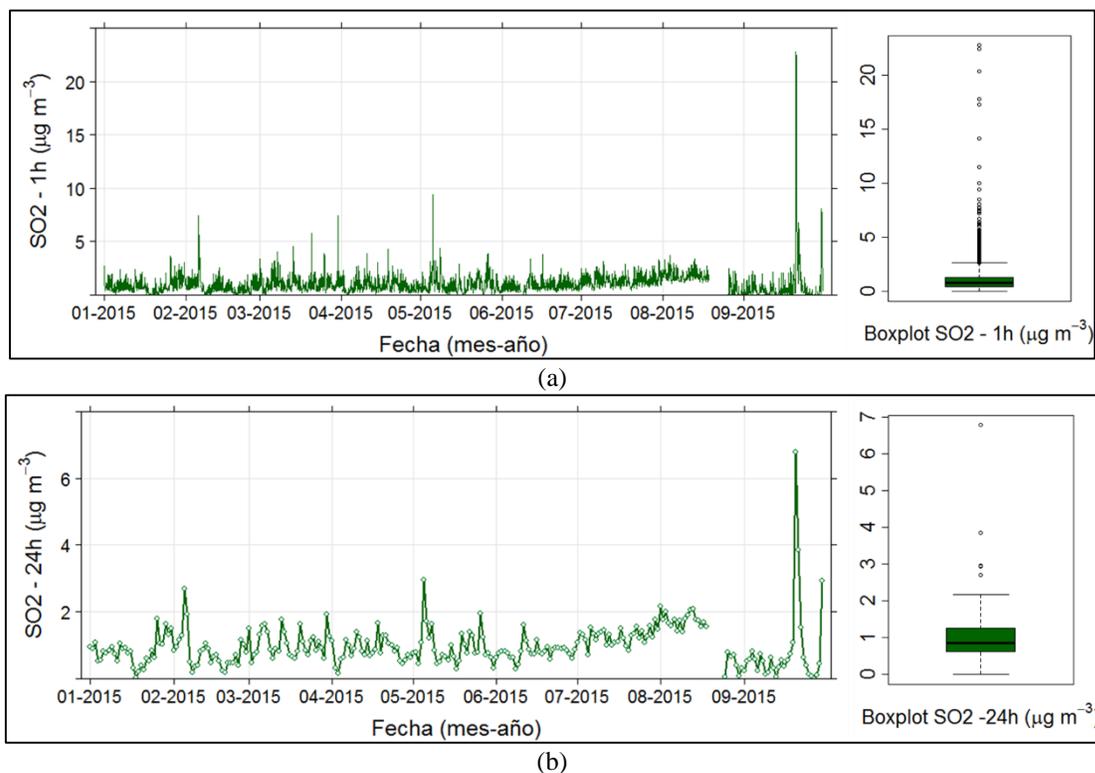


**Figura 3.10. Reportes de ciclos diurnos de O<sub>3</sub> durante el año 2015 en las RVCA de Medellín (izquierda) y Bogotá (derecha). Figuras tomadas de AMVA (2016) y SDA (2016)**

**Comportamiento de dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>)**

La variación temporal de las concentraciones horarias y diarias de SO<sub>2</sub> en la estación GOB durante el año 2015 se muestra en la Figura 3.11. La evolución de las concentraciones horarias (Figura 3.11a) presentó un promedio aritmético de 0.98 µg/m<sup>3</sup> (desv.std. = 0.98 µg/m<sup>3</sup>), con límites máximo y mínimo de 0 y 22.8 µg/m<sup>3</sup> respectivamente. De otra parte, la evolución de las concentraciones diarias (Figura 3.11b) presentó un promedio aritmético de 0.98 µg/m<sup>3</sup> (desv.std. = 0.64 µg/m<sup>3</sup>), con límites

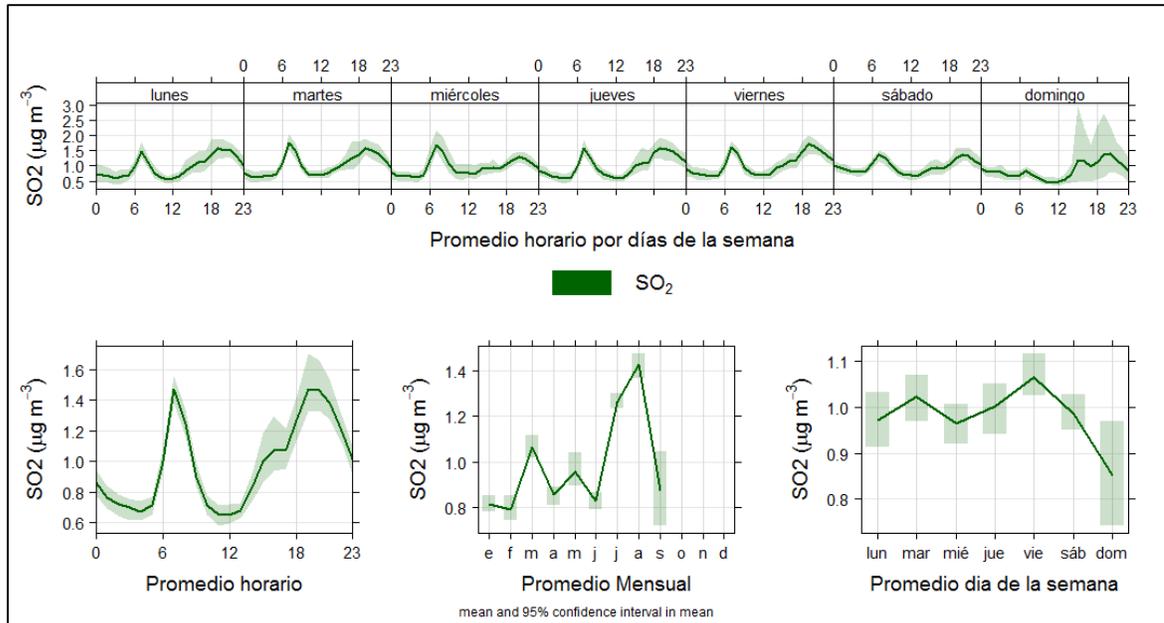
máximo y mínimo de 0 y  $6.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$  respectivamente. Se destaca que los límites máximos permisibles de 3 h y diario ( $750$  y  $250 \mu\text{g}/\text{m}^3$  respectivamente) no fueron superados durante el periodo de análisis.



**Figura 3.11. Concentraciones de  $\text{SO}_2$  obtenidas en la estación GOB durante el año 2015. a) Promedio horario. b) Promedio diario. Se muestran las series temporales de los datos (izquierda) y las gráficas de cajas y bigotes asociadas (derecha).**

La variación temporal promedio del  $\text{SO}_2$  en Manizales se puede observar en la Figura 3.12. Este contaminante registró un ciclo diurno con dos picos de concentración entre las 06:00 y 07:00 horas y entre las 19:00 y 20:00 horas cercanos a los  $1.6 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . Este perfil puede estar asociado a la influencia de fuentes antropogénicas (por ejemplo altos flujos vehiculares y emisiones industriales), sumado a las condiciones estables de la atmósfera que favorecen la acumulación de los contaminantes.

En general los registros de concentración de  $\text{SO}_2$  son altamente variables, tal como lo indican las gráficas de cajas y series temporales de la Figura 3.11; además los valores de desviación estándar cercanos al promedio hacen referencia a datos poco homogéneos. Cuesta (2017) realizó una comparación del promedio de  $\text{SO}_2$  obtenido entre julio de 2014 y agosto de 2015 en Manizales con reportes de otras ciudades de Colombia y el mundo. De forma general, en dicho trabajo se muestra como las concentraciones medias de  $\text{SO}_2$  en Manizales son muy bajas en comparación con reportes de otras regiones, como por ejemplo el Valle de Aburrá ( $11 \mu\text{g}/\text{m}^3$  en 2015) y la ciudad de Cali ( $4.5 \mu\text{g}/\text{m}^3$  en 2014) en Colombia.



**Figura 3.12. Variación temporal promedio de concentraciones de SO<sub>2</sub> en Manizales durante 2015. El intervalo sombreado indica el intervalo de confianza del 95% sobre el promedio.**

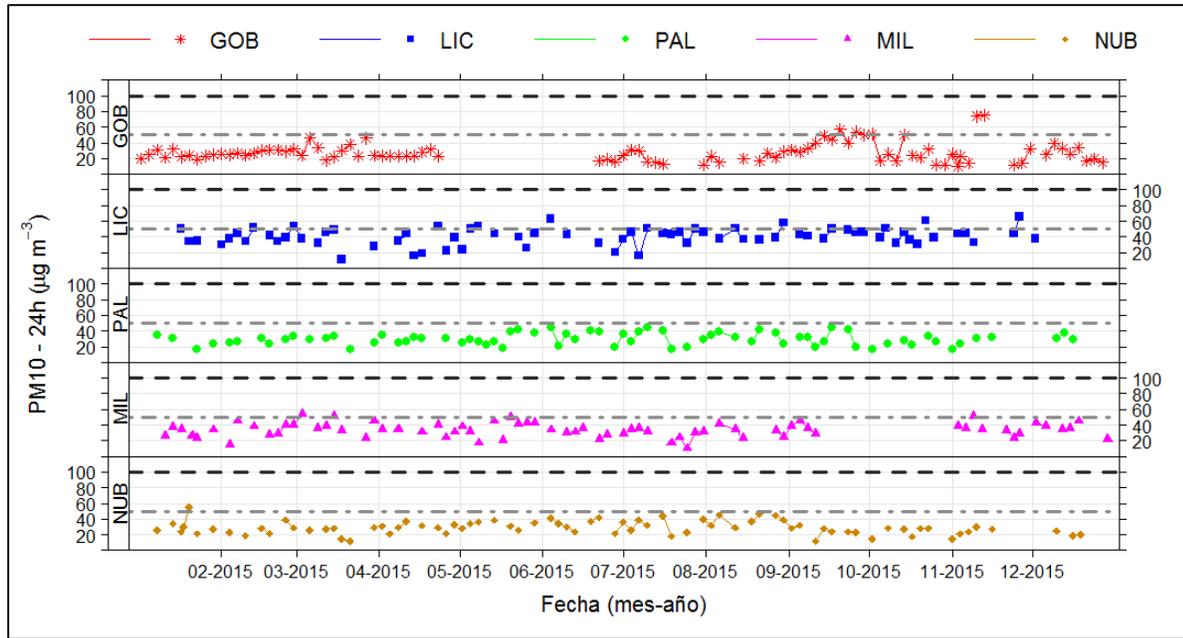
### *Comportamiento de material particulado (PM<sub>10</sub>)*

Tal como se muestra en la Figura 3.13, las concentraciones diarias de PM<sub>10</sub> en Manizales presentaron una evolución temporal caracterizada por valores de concentración por debajo de la norma diaria colombiana de (100 µg/m<sup>3</sup>). Sin embargo, los valores de concentración diaria especialmente en las estaciones LIC y MIL se encuentran muy cercanos al límite máximo diario recomendado por la OMS de 50 µg/m<sup>3</sup>. Estas dos estaciones se caracterizaron por las mayores concentraciones de PM<sub>10</sub>. En la estación LIC, se obtuvo un promedio anual de 40 µg/m<sup>3</sup> (desv.std. = 10.9 µg/m<sup>3</sup>), mientras que la estación MIL reportó un promedio anual de 34 µg/m<sup>3</sup> (desv.std. = 8.9 µg/m<sup>3</sup>).

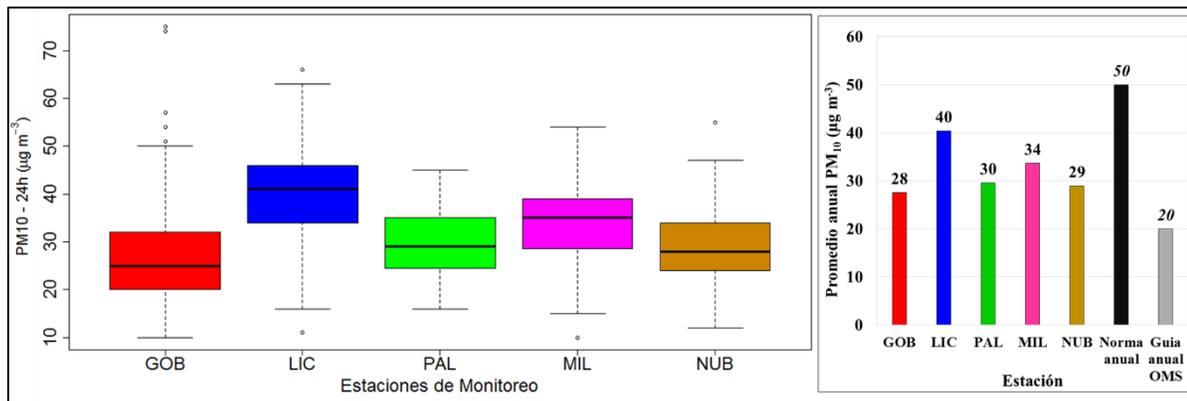
Los resultados de concentración promedio anual y diagramas de cajas para cada una de las estaciones de PM<sub>10</sub> se muestran en la Figura 3.14. Mayores concentraciones de PM<sub>10</sub> en la estación LIC pueden estar asociadas a la influencia del tráfico vehicular en una zona donde confluyen tanto vehículos de transporte público como privado (particulares y motos). Estudios previos han sugerido la influencia del tráfico vehicular sobre los mayores niveles de PM<sub>10</sub> en LIC principalmente (González, 2012; Velasco, 2015; González et al., 2015). Asimismo, la desagregación del inventario de emisiones para PM<sub>10</sub>, mostró como en las zonas cercanas a la estación LIC, se obtuvieron puntos críticos de emisión de este contaminante.

Las demás estaciones, PAL, NUB y GOB, reportaron resultados similares con promedios anuales de 30 µg/m<sup>3</sup>, 29 µg/m<sup>3</sup> y 28 µg/m<sup>3</sup> respectivamente. Entre estas estaciones la mayor variabilidad de los datos es reportada por GOB con una desv.std. = 12.4 µg/m<sup>3</sup>, superior a la registrada en NUB (8.4 µg/m<sup>3</sup>) y PAL (7.6 µg/m<sup>3</sup>). Tanto GOB como PAL tienen una influencia media de emisiones por tráfico vehicular, mientras que en NUB las emisiones vehiculares son reducidas pero la estación se encuentra en la principal zona industrial de la ciudad.

Es importante destacar que las concentraciones de PM<sub>10</sub> en todas las estaciones están por encima del límite máximo anual recomendado por la OMS de 20 µg/m<sup>3</sup>.



**Figura 3.13.** Evolución temporal de concentraciones diarias de PM<sub>10</sub> en Manizales durante el año 2015. El límite máximo permisible diario (100 µg/m<sup>3</sup>) se muestra en la línea punteada oscura, mientras la recomendación máxima diaria de la OMS (50 µg/m<sup>3</sup>) se muestra en la línea punteada gris.



**Figura 3.14.** Gráficos de cajas y bigotes de concentraciones diarias de PM<sub>10</sub> para las estaciones de CA en Manizales. A la derecha se muestran los promedios anuales obtenidos en cada estación.

### 3.4.2. MODELIZACIÓN NUMÉRICA DE LOS CONTAMINANTES O<sub>3</sub> Y PM<sub>10</sub> EN LA CIUDAD DE MANIZALES

Los resultados obtenidos en el estudio de la contaminación por O<sub>3</sub> y PM<sub>10</sub> en la ciudad de Manizales mediante modelización numérica, se consolidaron el siguiente manuscrito que se encuentra en proceso de revisión en la revista internacional *Atmospheric Pollution Research*. El material suplementario puede consultarse en el Anexo H.

#### HIGH-RESOLUTION AIR QUALITY MODELING IN A MEDIUM-SIZED CITY IN THE TROPICAL ANDES: ASSESSMENT OF LOCAL AND GLOBAL EMISSIONS IN UNDERSTANDING OZONE AND PM<sub>10</sub> DYNAMICS

C.M. González<sup>a\*</sup>, R.Y. Ynoue<sup>b</sup>, A. Vara-Vela<sup>b</sup>, S. Ibarra<sup>b</sup>, N.Y. Rojas<sup>c</sup>, B.H. Aristizábal<sup>a\*\*</sup>

<sup>a</sup>Hydraulic Engineering and Environmental Research Group (GTAIHA), Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, Carrera 27 64-60. Manizales, Colombia.

<sup>b</sup>Department of Atmospheric Sciences, Institute of Astronomy, Geophysics and Atmospheric Sciences, Universidade de São Paulo, Sao Paulo, Brazil.

<sup>c</sup>Air Quality Research Group. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá. Carrera 30 45-03. Bogotá, Colombia.

*Manuscrito en proceso de evaluación en la revista internacional Atmospheric Pollution Research*

#### Abstract

Atmospheric modeling is an essential tool for studying impacts of gases and aerosols on air quality. Application of high-resolution air quality models in the Andes Region is scarce, especially in medium-sized cities of South America, which are undergoing a fast urban growth, increasing the risk associated with air pollution episodes. In this study, the WRF-Chem model was applied for analyzing the influence of local and global emission inventories (EI) in the representation of O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> concentrations in the medium-sized Andean city of Manizales, Colombia. Furthermore, the relative impact of anthropogenic emissions on O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> dynamics was evaluated. The use of local emission fluxes allowed significant improvements in O<sub>3</sub> representation, characterized by better performance metrics (MGE, RMSE and r coefficient of 7.6 ppb, 8.8 ppb, and 0.81 respectively) than that obtained from the use of the EDGAR-HTAP global database (MGE = 11.6 ppb, RMSE = 13.9 ppb and r = 0.64). In terms of PM<sub>10</sub> concentrations, better metrics were obtained using the local EI (MGE = 10 µg/m<sup>3</sup> and RMSE = 11.5 µg/m<sup>3</sup>), compared with those from the global EI (MGE = 28 µg/m<sup>3</sup> and RMSE = 28.8 µg/m<sup>3</sup>). Analysis of the relative impact of anthropogenic emissions suggests that PM<sub>10</sub> levels and ozone chemistry were controlled by emissions of its precursors from on-road vehicular sources. Results obtained highlight the importance of estimating and improving local EIs in medium-sized cities, for a more realistic analysis of emission impacts, and a better understanding of air pollution over these urban environments.

**Keywords:** Air quality modeling; WRF-Chem; tropospheric ozone; particulate matter; local emissions; medium-sized Andean cities.

## 1. Introduction

During the last decades, the continuous growth of urban areas has produced high levels of traffic, industrialization and energy consumption, increasing emissions of air pollutants to the atmosphere. This phenomenon raised concern about air pollution episodes in urban environments and its adverse effects on human health, situation that is especially severe in cities of emerging countries (D'Angiola et al., 2010; Franco, 2012). High levels of urbanization characterize Latin American cities, with 79.5% of population living in urban areas by 2014, behavior observed not only in megacities but also in medium-sized cities with population less than 1 million inhabitants (UN, 2014). This fact emphasizes the necessity of robust Air Quality Management Plans (AQMP), which include abatement strategies to tackle air pollution events and prevention policies to avoid future pollution episodes. For this purpose, numerical modeling has been recognized as an essential tool for studying and forecasting the impacts and dynamics of gases and aerosols on air quality (Freitas et al., 2009), being a fundamental component of AQMP (Borge et al., 2014). The use of air quality models allows, for example, studying emission source contributions to air pollution, as well as the evaluating changes in pollutant concentrations with respect to various emission scenarios (Zárate et al., 2007).

Thanks to the computational advances during the last decades, eulerian three-dimensional chemistry transport models (CTM) with fully coupled meteorology and chemistry have been widely used for air quality studies (Longo et al., 2013). Furthermore, the recognized influence of weather in air quality (e.g. in transport processes, removal and chemical transformation) and the effects of chemistry in meteorology (e.g. in cloud formation and radiation budget), encouraged the development of unified and on-line modeling systems (Grell et al., 2005). According to Grell et al. (2011), the on-line approach in CTM is numerically more consistent and gives a more realistic representation of the atmosphere, especially when a high-resolution domain is required.

The complexity of urban centers makes the implementation of CTM a challenging task (Borge et al., 2014). One of its essential components is the emissions inventory (EI), which provides emission fluxes into the model for solving the mass continuity equation (Freitas et al. 2009). According to Alonso et al. (2010), the increase in the use of CTM on local, regional and global scales, makes the estimation of EIs a key issue, supported also by the fact that the representation of primary and secondary pollutants can be significantly improved when high-resolution emissions are used. However, there are still important deficiencies on emissions estimation worldwide, especially in emerging countries. Different efforts have been made by international cooperation programs in order to provide gridded emission information at global and regional scales. Global EIs such as RETRO (REanalysis of TROpospheric chemical composition) and EDGAR (Emissions Database for Global Atmospheric Research) are available to scientific community for its use in numerical modeling studies (Butler et al., 2008). Although global EIs are characterized by their low spatial and temporal resolution, some recent versions of global emission datasets have increased considerably their spatial resolution (e.g. EDGAR-v4 with 0.1x0.1deg). However, the information provided by these global datasets could differ from local EIs due to factors such as the use of activity data at a national level (e.g. from the energy balance statistics of the International Energy Agency, IEA), different approaches in the geographical distribution of emissions within each country (e.g. as a function of population density), and differences in emission sources and pollutants (Gurjar et al., 2004; Butler et al., 2008). These characteristics increase uncertainties in the representation of emissions, especially in urban areas of South America, where majority of countries have serious deficiencies in emission data and measurement campaigns (Alonso et al., 2010).

The use of CTM in South American countries has focused mainly in large urban areas. Some examples are the study of ozone ( $O_3$ ) formation in the Sao Paulo Metropolitan Region (SPMR) in Brazil (e.g. Da Silva et al. 2013; Vara-Vela et al., 2016; Hoshyaripour et al., 2016) and the Metropolitan Region of Lima in Peru (Arellano, 2013); the study of aerosol dynamics in SPMR

(Vara-Vela et al., 2016); the evaluation of a forecast system for southeastern Brazil (Andrade et al., 2015); the study of carbon monoxide (CO) and its use to obtain particulate matter (PM) predictions in Santiago, Chile (Saide et al., 2011); and the evaluation of industrial point-source emission scenarios in Buenos Aires, Argentina (Fernández et al., 2010). These studies reported the use of on-line CTM including local emission datasets. Furthermore, regional scale simulations in South America analyzed phenomena such as the effects of biomass burning emissions in the Amazon region (e.g. Freitas et al., 2007; Longo et al., 2010, 2013), the influence of vehicular emissions in transport of nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>), CO and O<sub>3</sub> (Alonso et al., 2010), and the study of windblown dust in Argentina (Cremades et al., 2017). Majority of these regional studies integrated both local and global emission datasets.

In Colombia, air quality studies using CTM are scarce and focused only in large cities such as Bogotá (the capital of Colombia) and Medellín, as they have not been fully integrated into air quality management systems. These cities reported previously the implementation of off-line CTM in studies such as the evaluation of two emission inventories in Bogotá (Zárate et al., 2007) and the analysis of NO<sub>x</sub> and VOC precursors in dynamics of O<sub>3</sub> formation in Medellín (Toro et al., 2006). Recent studies have reported the use of on-line CTM for the study of urban air pollution in Bogotá, analyzing the behavior of pollutants such as O<sub>3</sub>, CO and PM<sub>10</sub> (Kumar et al., 2014, 2016; Rincón, 2015; Nedbor-Gross et al., 2014; 2017). Clearly, medium-sized cities not only in Colombia but also in South American countries are scarce in air pollution studies, especially those using numerical models to understand the impact of emission sources on ambient air pollutant levels, and to study their dynamics of transformation and dispersion. These urban areas will experiment the fastest urban growth (UN, 2014), increasing the risk associated with possible air pollution episodes. However, the significant deficiencies in the knowledge of the local emission fluxes, combined with limited information about measurements of ambient air pollutants, produce additional difficulties in the application of CTM for the study of local air pollution dynamics.

The medium-sized city of Manizales, Colombia (urban population: 368000), is located on the western slopes of the central Cordillera of the Andes at 2150 m above sea level. Emissions from vehicular, industrial and volcanic sources influence the air quality in a city characterized by a limited area for growth and a relatively high urban density (~6800 inhabitants/km<sup>2</sup>). Furthermore, the low local wind velocities registered in the urban area - not exceeding 4 m/s – could enhance local pollution episodes. A recent EI estimated in Manizales (Gonzalez et al. 2017) revealed that on-road vehicular sources dominated the anthropogenic emissions, with higher vehicular releases of CO (43.4 Gg/yr) followed by non-methane volatile organic compounds (NMVOC) with 9.6 Gg/yr; mainly associated with the use of motorcycles. Other pollutants with more than 90% of contribution from anthropogenic sources were NO<sub>x</sub> (4.9 Gg/yr) and PM<sub>10</sub> (0.8 Gg/yr), being public transport (buses) its main source of emission. NO<sub>x</sub> and NMVOC are precursors of tropospheric ozone (O<sub>3</sub>), an important secondary pollutant in urban environments due to its harmful effects on human health and vegetation (Wang et al., 2017), and its contribution to radiative forcing and climate change effects (Karlsson et al., 2017). PM<sub>10</sub> is another pollutant of particular interest in the study of air quality over urban areas, linked with harmful effects on human health (Park et al., 2012). PM<sub>10</sub> is the main pollutant measured in Manizales air quality monitoring network (AQMN) (González et al., 2015).

There is a lack of knowledge about the relative impact of anthropogenic sources (vehicular and industrial) on O<sub>3</sub> formation and PM<sub>10</sub> ambient concentrations over Manizales, as well as on how the meteorology of this Andean region influence dispersion of these pollutants in the urban area and nearby zones. Considering this background and the existing deficiencies in the application of CTM in South American medium-sized cities – characterized by a lack of local emissions information, this study established two objectives: First, to evaluate the influence of using local or global EIs in the

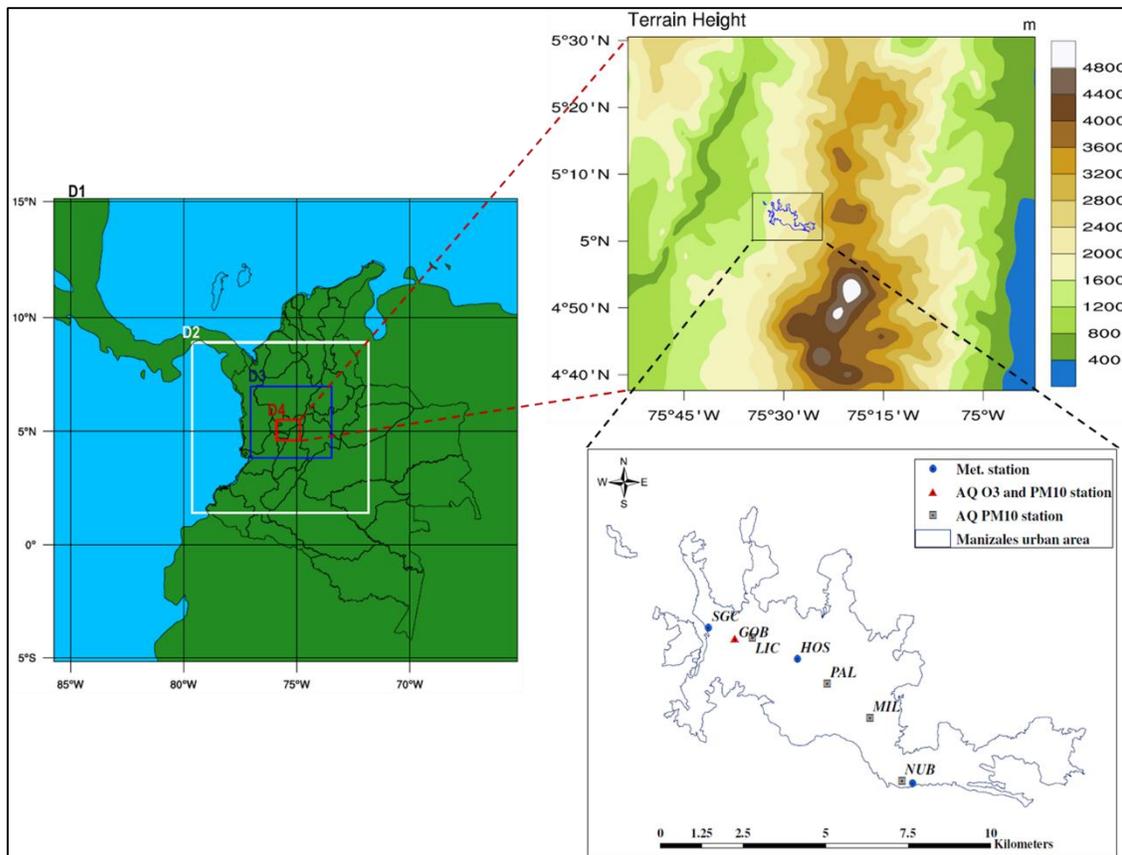
representation of O<sub>3</sub> profiles and PM<sub>10</sub> from the use of a CTM in Manizales. This analysis seeks to study the advantages or limitations of using global emission datasets in a high-resolution simulation, and to determine if the local EI could improve the representation of air pollutant dynamics in Manizales. Second, to study the relative impact of on-road vehicular and industrial point-source emissions on PM<sub>10</sub> concentrations and O<sub>3</sub> formation over this medium-sized Andean city.

## 2. Materials and methods

### 2.1. Model configuration and study design

The Weather Research and Forecasting with Chemistry community model (WRF-Chem) version 3.7.1 (Grell et al., 2005) was used for the air quality simulations. The Eulerian meteorological core of the model, The Advanced Research WRF (ARW), is fully compressible and non-hydrostatic. It is designed for both research and operational forecasting, includes two options of dynamic cores and several options of physical parameterizations (Skamarock et al., 2008). Modeling of trace gases and particulates is performed simultaneously with meteorological fields in WRF-Chem following an on-line approach. The model uses the same time step for transport and vertical mixing, same parameterizations and grid configuration, being fully consistent with the meteorological component (Fast et al., 2006). Further details on WRF-Chem modeling system are described in references cited above, as well as, several information can be found in model websites for both meteorology (<http://www.wrf-model.org>) and chemistry (<http://ruc.noaa.gov/wrf/wrf-chem/>) components.

WRF-Chem was configured with four nested domains (Fig. 1) and 35 vertical levels distributed from the surface to 50 hPa. Spatial resolution changed from 27 km in the coarse domain (D1), 9 km and 3 km in the intermediate domains (D2 and D3 respectively), and 1 km resolution in the inner domain (D4). Coarse domain was centered at 5.0546°N and 75.4886°W, covering the whole Colombia and parts of Pacific Ocean (to the east) and Caribbean Sea (to the north). High-resolution domain (D4) was centered at 5.0681°N and 75.3803°W, and was designed to include urban and rural areas of Manizales. The Central Cordillera of the Andes crosses the complete D4 in the south-north direction, being the active Nevado del Ruiz volcano the highest point in the summit at 5300 m above sea level. Data from the National Center for Environmental Prediction (NCEP) - Global Forecast System (GFS) Final Analysis (FNL) with 0.5° horizontal grid spacing and 6 h interval (<http://rda.ucar.edu/datasets/ds335.0/>), was used as meteorological initial (IC) and boundary conditions (BC). Chemistry IC and BC were obtained from the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4) (Emmons et al., 2010). Simulations in the high-resolution domain (D4) were performed from a one-way nesting modeling with IC and BC obtained from D3. The complete model configuration used in this study is summarized in Table 1. Chemistry options were chosen taking into account reports of previous studies in South America, where RADM2 and MADE/SORGAM mechanisms were employed in WRF-Chem simulations for the study of O<sub>3</sub> dynamics (Arellano, 2013; Kumar et al., 2014; Vara-Vela et al., 2016). Furthermore, Kumar et al. (2016) compared RADM2 and CBMZ gas phase chemistry in WRF-Chem simulations over Bogotá, Colombia, for the study of PM<sub>10</sub> urban air quality; showing a better performance of RADM2 scheme in representation of PM<sub>10</sub> 24 h average concentrations.



**Figure 1. Configuration of model simulation domains (left). Zoom maps are shown for the fine-grid domain D4 (top-right) and urban area of Manizales city (bottom-right), including location of monitoring stations used in this study (Met: Meteorology; AQ: Air quality).**

**Table 1. WRF-Chem configuration options for the baseline simulation in Manizales, Colombia.**

Parameter	Model configuration
Simulation period	One week dry period in 2015: June 28, 00:00 to July 5, 06:00 UTC (24 h spin-up)
Domain configuration	D1: 27 km resolution (85x85 grid points) D2: 9 km resolution (97x94 grid points) D3: 3 km resolution (133x118 grid points) D4: 1 km resolution (115x100 grid points)
Vertical levels	35 from the surface to 50 hPa
Static data	Topography: USGS (30 s resolution in D4) Land use: MODIS (20 land use categories)
Meteorology IC and BC	FNL analysis (0.5° resolution; 6 h interval)
Chemistry IC and BC	MOZART-4 global model (Emmons et al., 2010)
<i>Physical parameterizations</i>	
Microphysics	WSM6 (Hong and Lim, 2006)
Cumulus convection <sup>a</sup>	Grell-Freitas (Grell and Freitas, 2014)

<b>Parameter</b>	<b>Model configuration</b>
Planetary boundary Layer (PBL)	ACM2 (Pleim, 2007)
Long wave (LW) radiation	RRTM (Mlawer et al., 1997)
Short wave (SW) radiation	Dudhia (Dudhia, 1989)
Surface layer	Noah-LSM (Chen and Dudhia, 2001)
Land surface	Monin–Obukhov (Janjić, 2002)
<b><i>Chemistry options</i></b>	
Gas-phase mechanism	RADM2 (Stockwell et al., 1990)
Aerosols mechanism	MADE (Ackermann et al., 1998) / SORGAM (Schell et al., 2001)
Photolysis	Fast-J (Wild et al., 2000)

<sup>a</sup> Activated only in D1 and D2

Jiménez (2016) recommends the analysis of dry periods when a first evaluation of an atmospheric model is performed, especially in mountainous terrain, due to additional difficulties in the representation of meteorological variables during rainy days. Furthermore, O<sub>3</sub> production is enhanced during dry periods characterized by high incidence of solar radiation and temperature (Arellano, 2013). Taking into account these considerations and the availability of meteorology and air quality data measurements, the simulation period was designed for covering a one week dry period in 2015 (from June 28, 00:00 to July 5, 06:00 UTC). The first 24 h of integration of each run were discarded as spin-up time. A prior sensitivity analysis was performed for defining the physical parameterization schemes that best fit meteorological observations (temperature, relative humidity, wind speed and direction) and O<sub>3</sub> profiles in D4 domain. Model configurations evaluated for this sensitivity analysis are described in Table 2. These tests were designed based on previous studies performed in Colombia and other South American countries, which used the WRF-ARW model. Chemistry options were the same as those described in Table 1 for the three tests analyzed. The physical options defined for the baseline simulation (Table 1) were obtained from the sensitivity analysis described later in section 3.1.

## **2.2. Emissions**

The influence of using local or global EIs was evaluated comparing results for O<sub>3</sub> profiles and daily PM<sub>10</sub> concentrations measured in the medium-sized city of Manizales. For this purpose, four simulation cases were designed (Table 3). A first case (hereafter referred to “Local EI”) incorporates local emission fluxes in the fine-grid domain (D4) from the most recent EI estimated in the urban area of Manizales. Gonzalez et al. (2017) estimated annual fluxes of criteria pollutants (CO, NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub>, PM<sub>10</sub>), non-methane volatile organic compounds (NMVOC) and greenhouse gases (CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O) from on-road vehicular and point-source industrial sources, following a bottom-up approach and 2014 as base year. Disaggregation in time (1 h) and space (1 km x 1 km) of the on-road vehicular emissions was performed by Gómez et al. (manuscript under revision), following a top-down approach. Further details regarding local EI results and disaggregation of vehicular emissions are described in cited references. On the other hand, point-source industrial emissions were distributed uniformly in time (1 h) based on the specific information of working hours reported by each industry. These emissions were allocated in the same EI domain designed for vehicular emissions (1 km grid spacing). Then, the distributed local emission rates were scaled on WRF curvilinear coordinates using the chemical emissions pre-processor: Another Assimilation System for WRF-Chem

(AAS4WRF), developed by the Latin American Observatory (OLE2) (Vara-Vela et al., 2011, 2016; Muñoz et al., 2010, 2012). The other three simulation cases were designed for evaluating separately three available global emission inventories: RETRO, EDGAR-v4 and EDGAR-HTAP (see Table 3 for details). The PREP-CHEM-SOURCES version 1.5 emissions preprocessor (Freitas et al., 2011) was used for mapping global emissions into the fine-grid domain (D4).

**Table 2. Configuration of physics parameterizations evaluated in the preliminary sensitivity analysis.**

Simulation Id.	Physical parameterizations							Reference study
	Microphysics	Cumulus convection	PBL	LW radiation	SW radiation	Surface layer	Land surface	
Test_1	Lin	Grell 3D	YSU	RRTM	Goddard	Noah	Monin–Obukhov	Vara-Vela et al. (2016) <sup>a</sup> ; Arellano (2013) <sup>b</sup> ; Kumar et al. (2016) <sup>c</sup>
Test_2	WSM6	Grell-Freitas	YSU	RRTM	Dudhia	Noah	Monin–Obukhov	Arango and Ruiz (n.d.) <sup>d</sup>
Test_3 (baseline)	WSM6	Grell-Freitas	ACM2	RRTM	Dudhia	Noah	Monin–Obukhov	Arango (2014) <sup>e</sup>

<sup>a,b</sup> Studies performed in Sao Paulo, Brazil (Vara-Vela et al., 2016), and Lima, Perú (Arellano, 2013), using the WRF-Chem model.

<sup>c</sup> Kumar et al (2016) reported the use of Dudhia SW radiation scheme. The study evaluated the WRF-Chem model in Bogotá, Colombia.

<sup>d</sup> Evaluation of the WRF-ARW model in Bogotá, Colombia. The study reports the use of Grell-Devenyi cumulus scheme; however, in Test\_2 the Grell-Freitas scheme was evaluated. This scheme was based on Grell-Devenyi and is recommended for high-resolution simulations.

<sup>e</sup> Evaluation of the WRF-ARW model in Sogamoso Valley, Colombia. The study does not report a cumulus convection option; hence, the Grell-Freitas scheme was chosen for Test\_3 simulation.

Finally, the impact of local emission sources (vehicular and industrial) on O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> formation is discussed. For this purpose, two additional simulations were performed evaluating separately local on-road vehicular and industrial point-source emissions, and comparing results against those obtained from the use of the complete local EI and field observations of O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub>.

All simulations performed in this study included both biogenic emissions from the Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature (MEGAN) (Guenther et al., 2006) and dust emissions following the GOCART dust scheme (Ginoux et al., 2001). Furthermore, the main physics and chemistry options were defined according to the baseline configuration described in Table 1.

**Table 3. Emission characteristics of WRF-Chem simulations in Manizales.**

Simulation Id.	EI included in D4	Characteristics of emission data
Local EI	Local EI with on-road vehicular and point-source industrial emissions.	1 km x 1 km spatial resolution. 1 h temporal variability, 2014 as base year. Gaseous species: CO, NO <sub>x</sub> , SO <sub>2</sub> , NMVOC, CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> , N <sub>2</sub> O. Aerosols: PM <sub>10</sub>
Global EI-RETRO	Global emissions from the REanalysis of TROpospheric chemical composition (RETRO) ( <a href="http://accent.aero.jussieu.fr/RETRO_meta_data.php">http://accent.aero.jussieu.fr/RETRO_meta_data.php</a> )	0.5° x 0.5° spatial resolution. Monthly data, covering 1960 - 2000 Gaseous species: CO, CH <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , CH <sub>3</sub> OH, Formaldehyde, Acetaldehyde, Acetone, other Ketones, Toluene, Isoprene, Monoterpenes and Sesquiterpenes
Global EI-EDGARv4	Global emissions from the Emissions Database for Global Atmospheric Research (EDGAR) version 4	0.1° x 0.1° spatial resolution. Annual data, updated to 2005

Simulation Id.	EI included in D4	Characteristics of emission data
	( <a href="http://edgar.jrc.ec.europa.eu/methodology.php">http://edgar.jrc.ec.europa.eu/methodology.php</a> )	Gaseous species: CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , NMVOC, SF <sub>6</sub> , N <sub>2</sub> O, CH <sub>4</sub> , CO <sub>2</sub> Aerosols: PM <sub>10</sub> and PM <sub>2.5</sub> , and carbonaceous speciation (BC, OC)
Global EI-EDGAR-HTAP	Global emissions from the EDGAR-HTAP project, which uses nationally reported emissions combined with regional scientific inventories ( <a href="http://edgar.jrc.ec.europa.eu/htap.php">http://edgar.jrc.ec.europa.eu/htap.php</a> )	0.1° x 0.1° spatial resolution. Annual data, updated to 2010 Gaseous species: CO, SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , NMVOC, NH <sub>3</sub> , CH <sub>4</sub> , CO <sub>2</sub> Aerosols: PM <sub>10</sub> and PM <sub>2.5</sub> , and carbonaceous speciation (BC, OC)

### 2.3. Field measurements and model evaluation

Surface observations of temperature (T), relative humidity (RH), wind speed (WS), wind direction (WD) and accumulated total precipitation (RAIN) were obtained from three meteorological stations distributed along the urban area of Manizales city. Location of the stations is shown in Fig. 1. Two of them (*SGC* and *Hospital*) are part of the Manizales Meteorological Network, and meteorological reports can be obtained with 5 min interval from the *Centro de Datos e Indicadores Ambientales de Caldas – CDIAC* (<http://cdiac.manizales.unal.edu.co/>). From these reports, it was possible to confirm the dry condition in the city during the simulation period. Information from the third station located at east in the airport of the city (Nubia station), was obtained from the Automated Surface Observing System (ASOS) (<https://mesonet.agron.iastate.edu/>) which contains airport weather observations from different agencies around the world. Hourly information from Nubia station is available during daytime only.

Surface ambient concentrations of O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> were obtained from Manizales AQMN, which is operated by the local environmental authority, CORPOCALDAS, supported by GTAIHA research group of Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales. The AQMN has one station for O<sub>3</sub> monitoring (GOB station), which is located in downtown Manizales and holds a Teledyne-API Photometric Ozone Analyzer (Model T400). The station reports hourly O<sub>3</sub> concentrations. Finally, PM<sub>10</sub> data was obtained from five monitoring stations equipped with Hi-Vol samplers. PM<sub>10</sub> monitoring is performed each three days in the city; hence, two 24 h average PM<sub>10</sub> reports (1<sup>st</sup> and 4<sup>th</sup> July 2015) were available during the simulation period. Fig. 1 shows the location of O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> stations used in this study.

Quantitative model performance evaluation was applied for comparing observational data and simulation results. The following statistical performance metrics were calculated using the software R and the Openair package (Carslaw and Ropkins, 2012): mean bias (MB), mean gross error (MGE), root mean squared error (RMSE) and Pearson correlation coefficient (r). Different studies conducted around the world have used these statistics for model evaluation purposes (Borge et al., 2008; Hoshyaripour et al., 2016; Kumar et al., 2016). Moreover, Taylor diagrams (Taylor, 2001) were plotted for model-observation comparison in terms of centered RMSE, r and standard deviation. Definitions of statistics used in this study are defined in section A of supplementary material.

## 3. Results and discussion

### 3.1. Selection of best physical configuration and evaluation of model performance

Overall, the three tests defined for previous sensitivity analysis showed similar results in evaluation metrics for all meteorological variables (Table 4). Hence, selection of the baseline simulation was centered mainly in O<sub>3</sub> results, and the ability to represent the dry condition. For these features, better performance was obtained with Test\_3 simulation. This test was characterized by lower values of

the statistical metrics for O<sub>3</sub> concentrations: MB (-6.6 ppb), MGE (7.6 ppb), and RMSE (8.8 ppb). Also, higher values of r coefficient (0.8) suggest a better agreement with observed O<sub>3</sub> diurnal profiles. Better performance of Test\_3 was associated with the use of a different PBL physics scheme. Both PBL parameterizations evaluated in this study (YSU in Test\_1 and Test\_2, and ACM2 in Test\_3) are first-order non-local closure schemes, which according to Cuchiara et al. (2014), are characterized by better performance in the daytime convective boundary layer than local closure schemes. Hu et al. (2010) and Hariprasad et al. (2014) suggested that ACM2 enhances PBL heights during the convective daytime profiles, compared with those obtained from YSU. By contrast, during nighttime stable conditions, YSU provides higher PBL heights than ACM2, which uses a local closure approximation in stable conditions - being only local eddy diffusion the cause of vertical mixing. These authors suggest also that the ACM2 scheme tends to produce smaller winds, a warmer and drier mixed layer and slightly higher incoming solar radiation. This behavior was observed in Manizales for the Test\_3 simulation, characterized by lower overestimation of RH and a lower warm bias during the day, factor that could enhance photolysis reactions with subsequent O<sub>3</sub> formation. This hypothesis is supported by statistical metrics obtained for daytime O<sub>3</sub> concentrations, represented by lower values of MGE (7.65 ppb) and RMSE (8.87 ppb) in Test\_3 compared with those obtained from the other simulations (see Table B.1 of supplementary material). Overall, an accurate correlation was obtained in hourly O<sub>3</sub> representation in Manizales, with r coefficient and RMSE values of 0.81 and 8.81 ppb respectively. These statistics were similar to those reported in other studies using WRF-Chem. Hoshyaripour et al. (2016) reported metric values between 0.7 – 0.8 (r coefficient) and 10.4 – 13.7 ppb (RMSE) in Sao Paulo, Brazil. Ritter et al. (2013) performed WRF-Chem simulations over complex terrain in Switzerland and reported hourly metric values between 26.7 – 31.4 ppb for RMSE and r coefficient around 0.7.

The analysis of meteorological variables exhibited underestimation of 2 m temperature (T) around 2 °C, described by the negative MB (-2.3 °C) and MGE of 2.3 °C for Test\_3 (Table 4). The MGE obtained from simulated T in Manizales, satisfied the meteorological model performance benchmark in complex terrain (MGE ≤ 3.5) proposed by Talgo et al. (2015) and a good overall agreement of T was supported by its r coefficient (0.9). Ritter et al. (2013) reported similar statistical metrics for T in WRF simulations over a complex terrain in Switzerland. Opposite behavior was observed for 2 m relative humidity (RH), with an overestimation of RH characterized by positive MB and values of MGE and RMSE around 8% and 10% respectively (Test\_3 metrics). Similar results were obtained by Kumar et al. (2016) from complex terrain simulations in Bogotá, Colombia, with RH metrics of 11.6 and 14.3 % for MGE and RMSE respectively. Furthermore, the diurnal variation of T and RH was captured reasonably well by the baseline (Test\_3) model simulation at all meteorological stations, as shown in Fig. 2.

Major differences were obtained in the representation of wind patterns. Overall, the positive MB of 0.34 m/s and a MGE of 1.17 m/s suggest an overestimation of wind speed (Table 4). This pattern was higher at west (SGC station) and center (HOS station) of the city (see Fig. 2 and Table B.1 in the supplementary material). On the other hand, winds at east of the city (NUB station) tend to be underestimated. This variable is especially difficult to predict in mountainous regions (Nedbor-Gross et al., 2014). However, results satisfied the model performance benchmarks for WS in complex terrain with MB ≤ 1.5 m/s and RMSE ≤ 2.5 m/s (Talgo et al., 2015). Factors such as unresolved topographical features, and differences in land cover and roughness have been suggested in other studies (both simple and complex terrain) for explaining wind overestimation by WRF and WRF-Chem model (Schürmann et al., 2009; Tuccella et al., 2012; Zhang et al., 2015; Vara-Vela et al., 2016; Kumar et al., 2016; Gunwani and Mohan, 2017). In that sense, the use of more accurate static data in future experiments (for example using high-resolution topography), could refine the unresolved topographic features over this complex terrain, improving the results obtained in simulations. In terms of wind direction patterns, simulation results were compared based on both

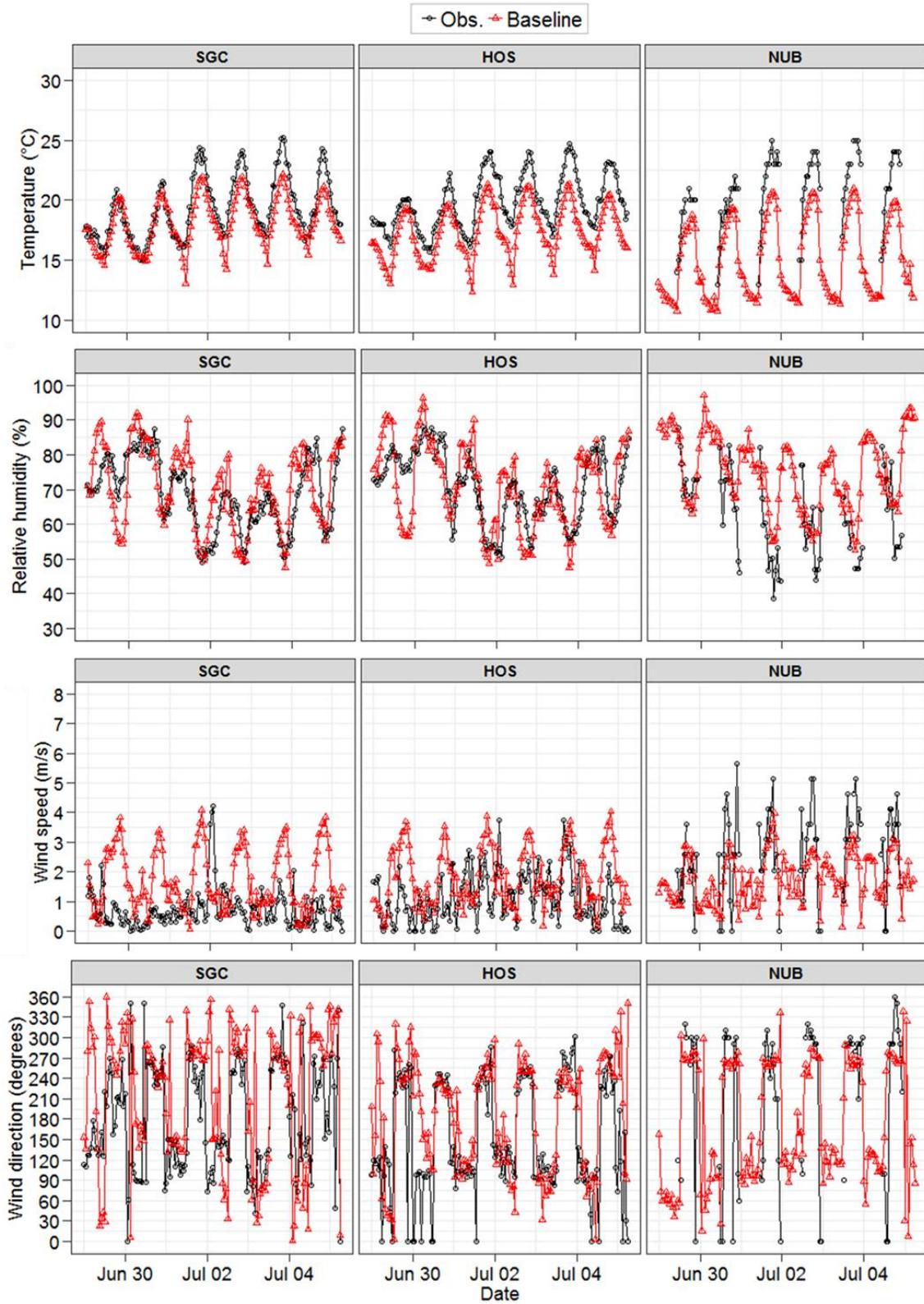
statistical metrics evaluation (Table 4), and qualitative analysis using hourly diurnal variation (Fig. 2) and wind roses for differential daytime – nighttime periods (Fig. 3). As it is shown in Fig. 2, the diurnal profiles of WD were represented in a better way at center and east of the city (HOS and NUB stations respectively). These wind roses indicate that the model tends to capture predominant wind observed reversal patterns influenced by orographic effects, and characterized by different day/night air movements. During the day, upslope winds are predominantly from west and southwest, while during the night, downslope winds are coming mainly from east and southeast of the city. The low representation of winds at west of the city (SGC station), could be attributed to the complex topography variations over this area, characterized by high altitude terrain zones (SGC station is located at 2220 m.a.s.l while mean altitude of the city is 2150 m.a.s.l). Furthermore, there are significant changes in altitude and slope around SGC station, where altitude decrease rapidly to the west in direction to the Cauca river Valley, with regions at 800 m.a.s.l. This valley is located between the Central and Western Cordillera of the Andes.

**Table 4. Performance statistics in the preliminary sensitivity analysis<sup>a</sup>.**

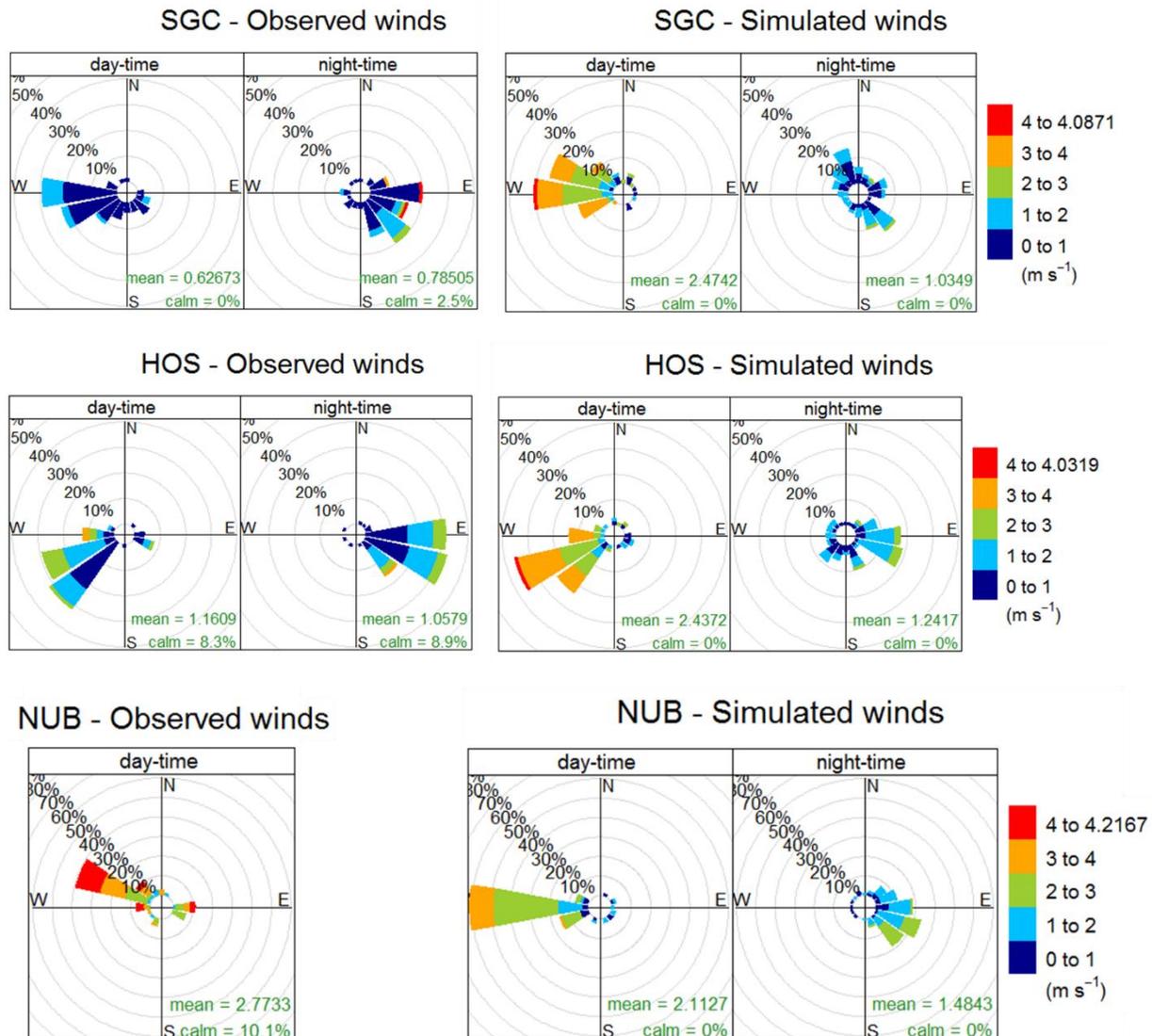
Simulation Id.	Statistic	Variable					
		T	RH	WS	WD	RAIN	O <sub>3</sub> <sup>b</sup>
Test_1	MB	-2.01	6.62	0.31	46.28	1.62	-7.15
	MGE	2.06	9.45	1.21	86.38	1.62	8.41
	RMSE	2.28	11.32	1.47	121.25	1.96	10.04
	r	0.93	0.65	0.17	0.26	-	0.7
Test_2	MB	-2.09	3.31	0.21	29.81	0.20	-7.47
	MGE	2.15	8.21	1.16	76.07	0.20	9.28
	RMSE	2.40	10.22	1.40	109.88	0.22	10.76
	r	0.91	0.63	0.25	0.41	-	0.62
Test_3 (baseline chosen)	MB	-2.22	2.58	0.34	37.49	0.0	-6.64
	MGE	2.28	8.08	1.17	71.23	0.0	7.63
	RMSE	2.53	10.20	1.46	104.89	0.0	8.81
	r	0.90	0.60	0.25	0.37	-	0.81

<sup>a</sup> Values were averaged from the individual indexes calculated at each meteorological station (SGC, HOS and NUB) from both hourly observations and simulation results. Individual indexes per station are described in Table B.1 of supplementary material.

<sup>b</sup> Ozone metrics correspond to model evaluation at GOB air quality station.



**Figure 2. Observed and predicted hourly variations of temperature, relative humidity, wind speed and direction at SGC, HOS and NUB meteorological stations, for the baseline simulation in the 1 km modelling domain (D4).**

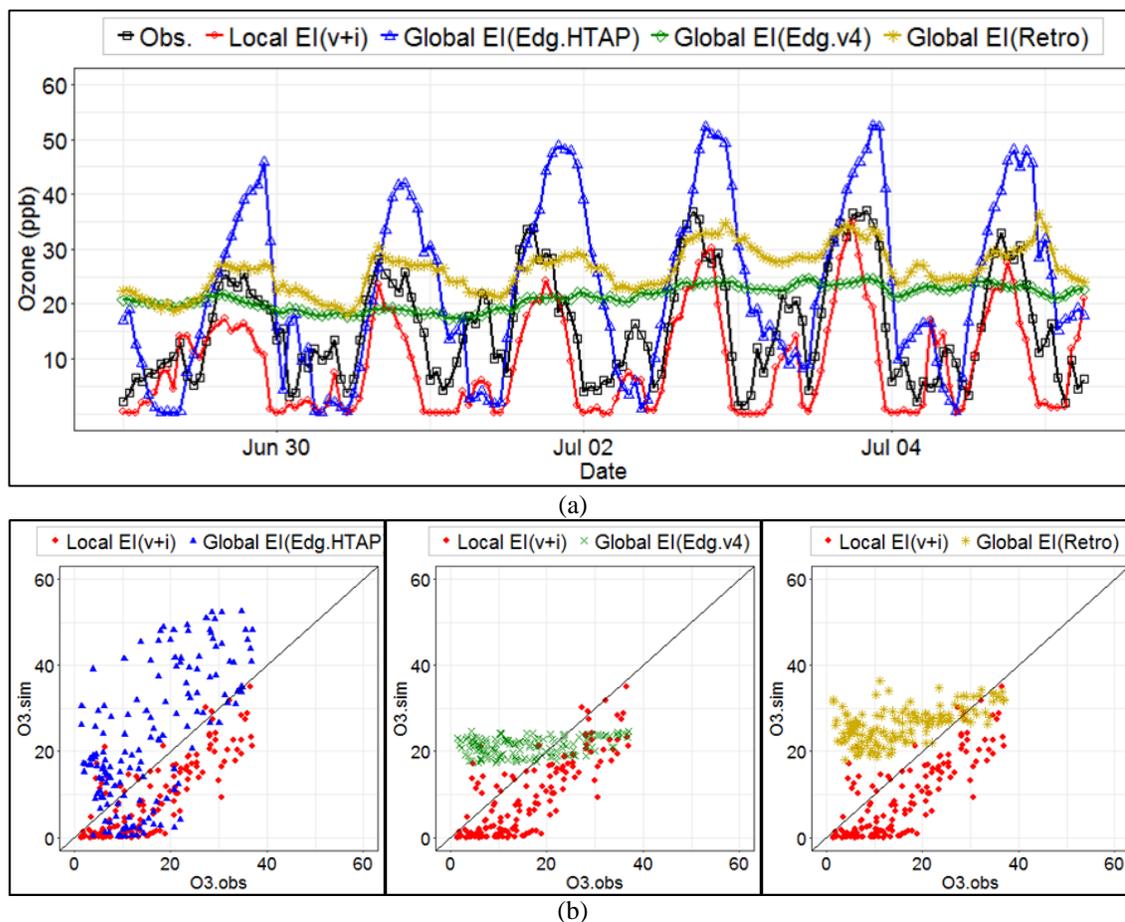


**Figure 3.** Observed and predicted wind roses during day-night periods at SGC, HOS and NUB stations for the baseline simulation in the 1 km modelling domain (D4).

### 3.2. Influence of local and global emission datasets in tropospheric ozone ( $O_3$ ) representation

The simulation with local emission fluxes in the medium-sized Andean city of Manizales produced more accurate representation of  $O_3$  profiles, compared with those obtained using global emission datasets. Fig. 4a shows the temporal variation of hourly  $O_3$  concentrations from simulations with the local and three different global EIs (see Table 3 for details). Although the use of local emissions tends to underestimate daily maximum peaks of ozone (mean observed = 32.4 ppb  $\pm$  4.7; mean simulated = 26.2 ppb  $\pm$  6.1), lower dispersion of data and better agreement with observations was revealed from the analysis of scatter plots (Fig. 4b). The Taylor diagram (Fig. B.1 in the supplementary material) confirmed this analysis showing a higher correlation coefficient (0.81 with Local EI against 0.64 with EDGAR-HTAP), and better agreement in terms of standard deviation for local emissions. This result highlights the importance of estimating local EIs in urban environments of medium-sized cities, not only for improving results of numerical modeling and the understanding

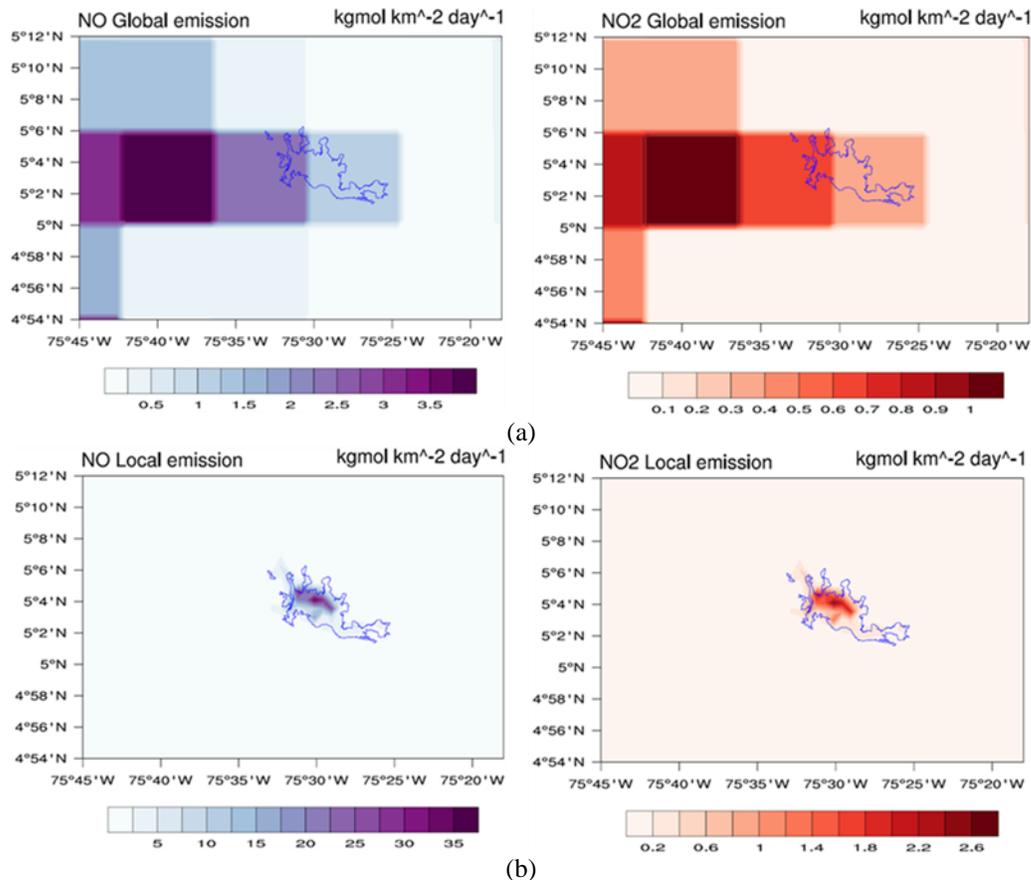
of urban air pollution dynamics, but also for establishing realistic bases in the development of AQMP.



**Figure 4. Comparison of observed and predicted hourly variations of surface ozone in Manizales (GOB station) using local and global EIs. a) Temporal variation. b) Scatter plots including each global EI and the local emissions.**

Comparing simulations with the three global EIs, the best result was obtained with that one using EDGAR-HTAP EI. EDGAR-HTAP emissions are characterized by a relatively higher resolution ( $0.1^\circ$  in EDGAR against  $0.5^\circ$  in RETRO) and the inclusion of most updated annual fluxes of ozone precursors ( $\text{NO}_x$  and NMVOC) with 2010 as base year. This emission inventory allowed representing the formation of diurnal profiles characterized by  $\text{O}_3$  production and depletion, following the observed tendencies during daytime (see Fig. 4a). However, daily maximum  $\text{O}_3$  concentrations from EDGAR-HTAP simulation deviated further up from the observations (mean =  $48.3 \text{ ppb} \pm 3.9$ ). Analyzing allocation of  $\text{NO}_x$  fluxes in the fine grid domain (Fig. 5a), the emission hotspots were allocated outside the urban area towards west, in a zone with full rural land use coverage and anthropogenic activities with little influence of  $\text{NO}_x$  releases. The low resolution of emission data ( $\sim 10 \text{ km}$ ) compared with the small urban area of Manizales ( $\sim 54 \text{ km}^2$ ) explains this unrealistic distribution of emissions. This phenomenon influences the subsequent dynamic of  $\text{O}_3$  formation in Manizales. Fig. 6 shows simulated mean hourly surface concentrations of  $\text{O}_3$  and  $\text{NO}_2$  for different hours of the day. The large hotspot area of  $\text{NO}_x$  emission enhances  $\text{O}_3$  titration reactions during hours with little to non-influence of shortwave radiation. Furthermore, due to this emissions

distribution, the formation of  $O_3$  in Manizales was characterized by movements of air masses towards east and northeast from  $NO_x$  emission hotspot. This transport increased  $O_3$  concentration in Manizales urban area and nearby zones located mainly to the north of the city.



**Figure 5. Distribution of NO (left) and  $NO_2$  (right) emission fluxes scaled into D4 domain for WRF-Chem simulations. Emissions are shown for a) EDGAR-HTAP EI, and b) Local EI. Maps are zoomed to show Manizales urban area (blue shape) and nearby rural zones.**

On the other hand, the most accurate representation of  $O_3$  profiles from the use of local EI was clearly influenced by improvements in emissions allocation (Fig. 5b). In spite of the small urban area of the city, emission hotspots were well represented in the model domain, with higher emission zones in downtown and neighboring residential-commercial areas where the main street (Santander Avenue) passes through. From these emissions, the dynamics of production and consumption of  $O_3$  was characterized by its local effects, with a slight pollutant transport toward northeast during midday influenced by prevailing winds coming from the west (see Fig. 7). This dispersion had a subsequent impact on  $O_3$  hotspot formation outside the urban area towards northeast. Furthermore, temporal analysis suggests that diurnal cycle of  $O_3$  production and depletion is only generated inside and around the urban area of Manizales, due to the influence of NMVOC and  $NO_x$  anthropogenic emissions. A relatively constant  $O_3$  concentration was observed towards east and southeast of the city, where the Central Cordillera of the Andes reaches its higher altitude in the summit of the Nevado del Ruiz volcano ( $\sim 5300$  m above sea level), and areas of forest and grasslands prevailed. Therefore, emission of  $NO_x$  species around this area should be minimum, and NMVOC should come only from biogenic sources. In order to have an idea of model accuracy in representing  $O_3$  patterns

over this rural area, mean O<sub>3</sub> concentrations data from two passive sampling campaigns (~ 1 month each) performed during February and November of 2015 were compared with mean predicted O<sub>3</sub> concentrations during the one-week dry period (Table 5). Passive sampling monitoring (PAS) was performed in twelve stations spread all over the urban area of Manizales (8 stations) and rural zones located towards southeast (4 stations), all of them reaching different altitudes in direction to the summit of the Central Cordillera of the Andes. Further details of PAS study are described by Cuesta et al. (2017). Comparative results shown in Table 5 and Fig. B.3 of the supplementary material suggest that the model captured the differences of O<sub>3</sub> levels between the urban area (low mean concentrations as a result of O<sub>3</sub> hourly production and consumption) and the rural zone, characterized by a relatively constant background O<sub>3</sub> level. Such differences in the rural zone would probably be controlled by precursors from biogenic sources. Mean O<sub>3</sub> concentrations were almost two times higher in mountainous zones than in Manizales urban areas, even though these areas do not concentrate high pollutant loadings. This behavior could be explained taking into account the dependency of ozone with altitude (Ritter et al., 2013), influenced by factors such as vertical transport and thermally induced mass transport circulations from polluted areas (Wang et al., 2015; Zhang et al., 2015). It is important to emphasize that this comparison was performed for indicative purposes only. However, the analysis suggests that WRF-Chem simulations could provide a realistic representation of O<sub>3</sub> dynamics in both urban and rural zones of Manizales and nearby areas along the Andean mountains.

**Table 5. Comparison of mean O<sub>3</sub> concentrations obtained from two PAS campaigns during 2015 in Manizales (urban and rural stations), and mean O<sub>3</sub> concentration simulated in this study. Detailed information about PAS study is described in Cuesta et al. (2017).**

PAS station Id. <sup>a</sup>	Altitude m.a.s.l. <sup>d</sup>	Location	Traffic influence	Mean O <sub>3</sub> (ppb)	
				Obs. <sup>b</sup>	Sim. <sup>c</sup>
P5	2219	Urban – West	Medium	14.8	9.2
P7	2258	Urban – Downtown	Medium	13.0	9.2
P6	2161	Urban – Downtown	High	12.8	9.8
P8	2154	Urban – Center	Medium	18.7	11.6
P4	2087	Urban – North	High	8.3	11.4
P9	1900	Urban – South	High	8.2	10.4
P10	2251	Urban – Northeast	Low	21.7	18.8
P11	2091	Urban – East	Low	17.4	16.1
P12	2325	Urban – East	Low	16.5	22.7
P2	2350	Rural – Southeast	None	21.4	24.1
P1	3467	Rural – Southeast	None	23.3	25.6
P3	3657	Rural – Southeast	None	28.5	25.6

<sup>a</sup> Map with location of PAS stations is shown in Fig. B.2 of supplementary material.

<sup>b</sup> Mean observed O<sub>3</sub> concentration from two PAS campaigns (30 days each) performed during February and November of 2015.

<sup>c</sup> Mean simulated O<sub>3</sub> concentrations were obtained from the complete one-week dry period simulated in this study with local emission fluxes.

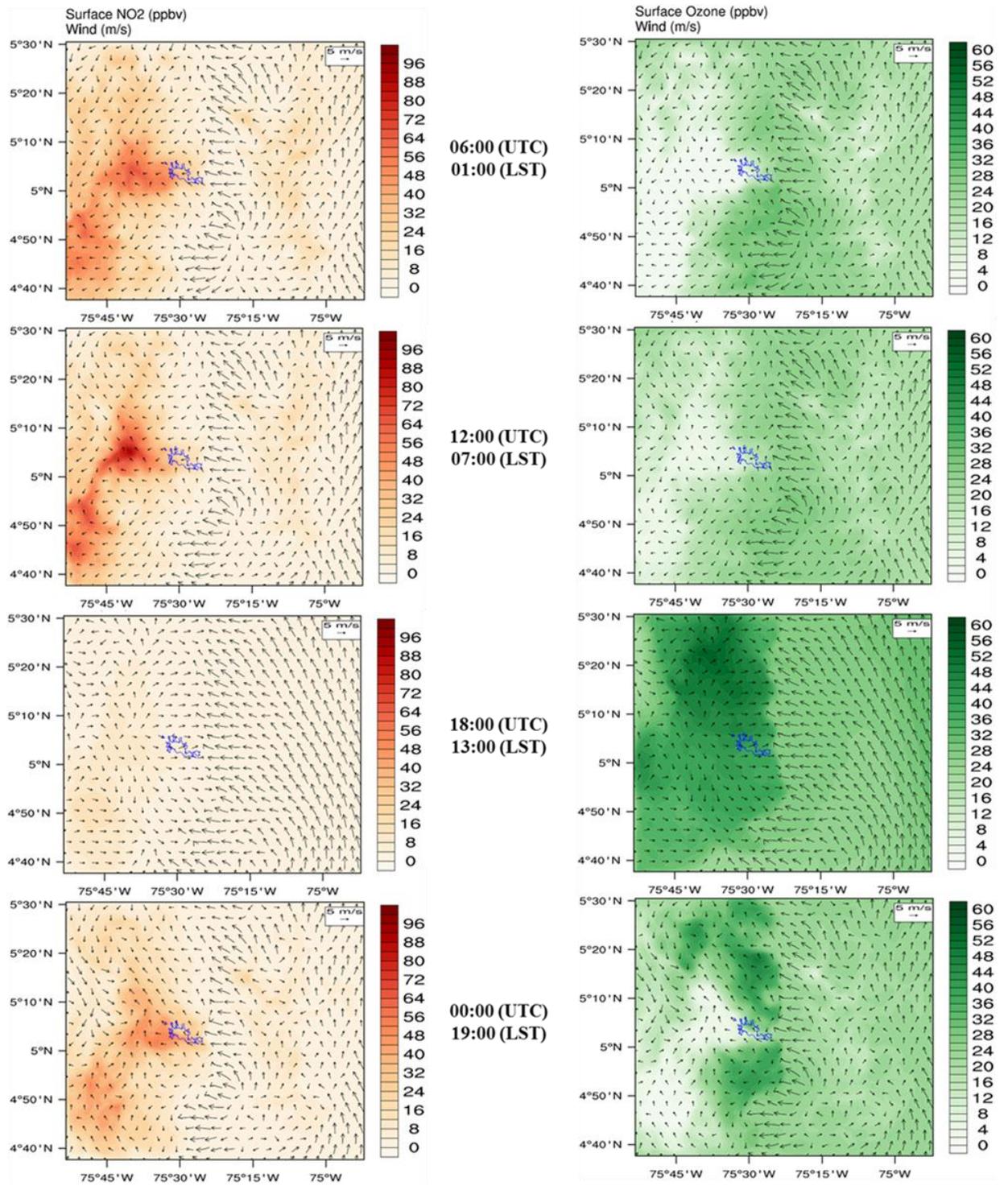
<sup>d</sup> m.a.s.l.: m above sea level.

Toro et al. (2006) studied dynamics of O<sub>3</sub> formation in the Aburrá Valley, Colombia, a mountainous region with the second most important city of the country (Medellin). Their study suggests that ozone

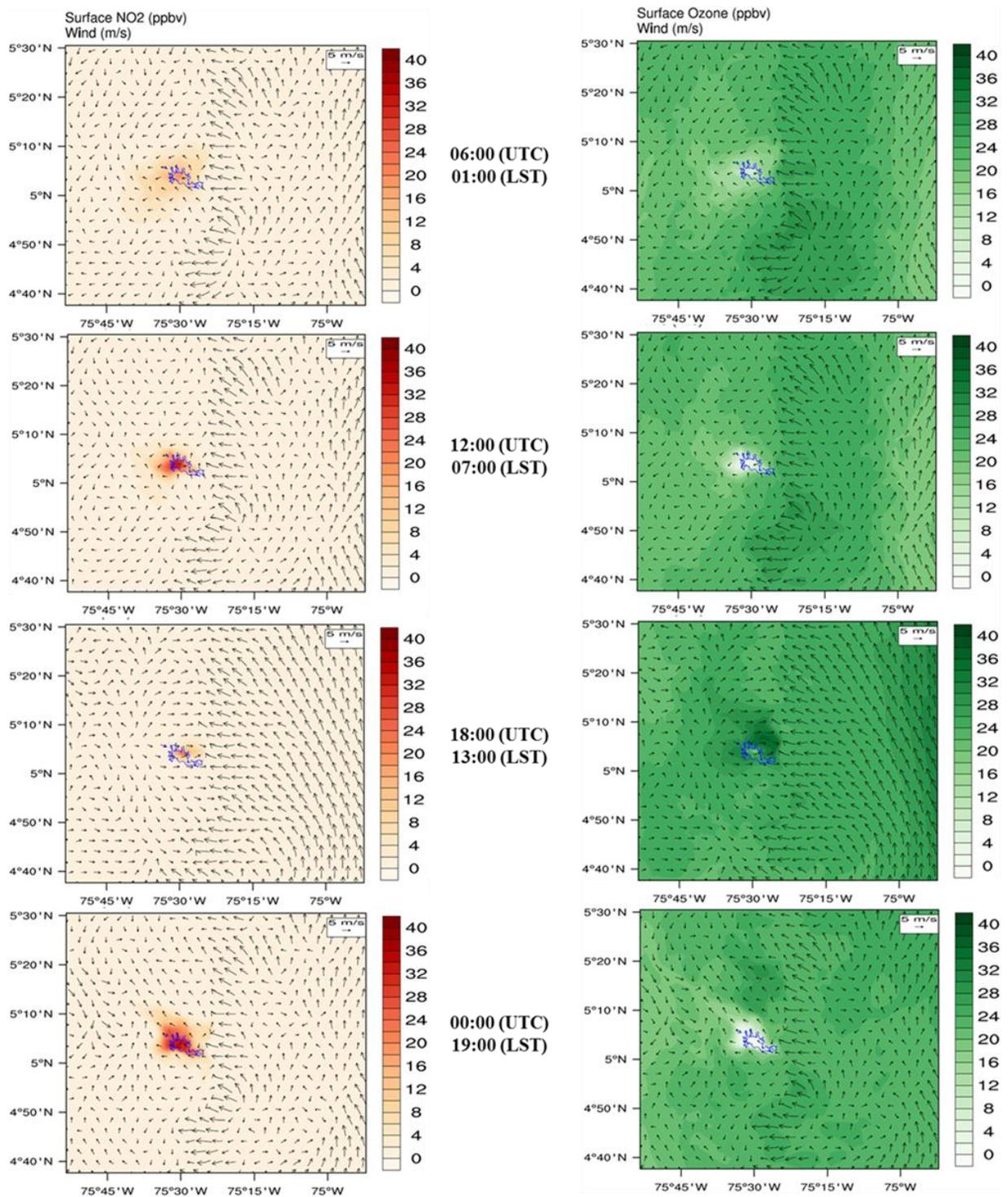
production is more sensible to  $\text{NO}_x$  concentrations and that high values of  $\text{VOC}/\text{NO}_x$  emission ratios (e.g.  $> 1$ ) are responsible of lower  $\text{O}_3$  concentrations in the air. This is due to predominance of  $\text{VOC}-\text{OH}$  reactions and possible consumption of  $\text{NO}$  molecules by some  $\text{VOC}$ , avoiding  $\text{NO}_2$  formation. Higher fluxes of  $\text{NMVOC}$  than  $\text{NO}_x$  were estimated in Manizales (Gonzalez et al., 2017), with a total  $\text{NMVOC}/\text{NO}_x$  emission ratio around 2. Therefore, the underestimation of  $\text{O}_3$  peaks in Manizales could be related to an underestimation of  $\text{NO}_x$  or an overestimation of  $\text{NMVOC}$  emission fluxes in the local EI. On the other hand, nighttime  $\text{O}_3$  underestimation could be explained by a possible excessive titration of  $\text{O}_3$  from high  $\text{NO}_x$  concentrations, as well as other factors such as a very stable and shallow PBL during nighttime as suggested by Hoshyaripour et al. (2016), who found similar underestimation of nighttime  $\text{O}_3$  profiles in Sao Paulo, Brazil. In spite of the overall accurate results in  $\text{O}_3$  representation obtained in Manizales, the lack of field measurements such as PBL height and hourly information of other pollutants such as  $\text{NO}_x$ ,  $\text{NMVOC}$  and  $\text{CO}$ , makes it difficult to perform a complete analysis about the causes of  $\text{O}_3$  underestimation. Hence, further analysis on this field could improve the results here obtained from this first simulation exercise in the medium-sized Andean city of Manizales.

### ***3.3. Local emission sources contribution on $\text{O}_3$ formation***

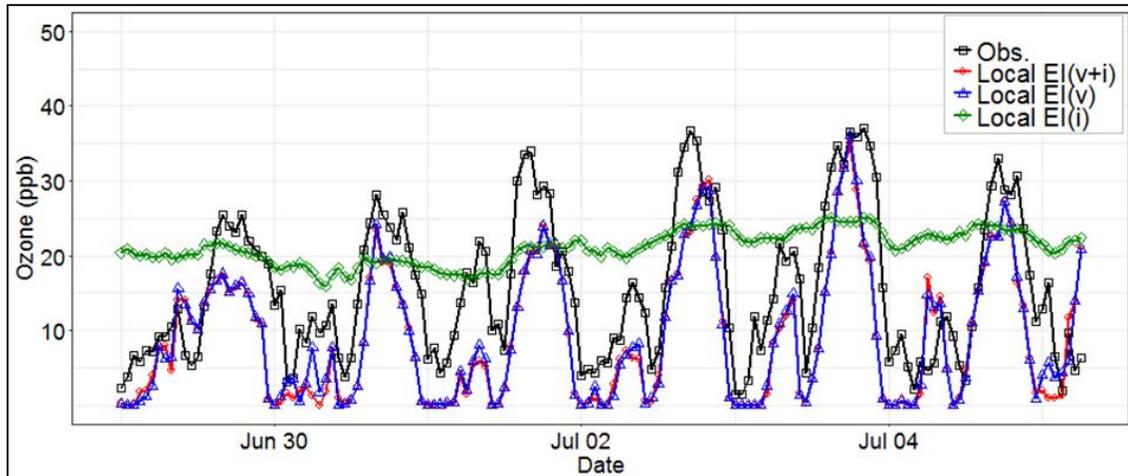
Ozone photochemistry in Manizales was controlled by emissions of its precursors from on-road vehicular sources. This fact was clearly demonstrated in Fig. 8, which shows modeling results for three different scenarios: 1) The baseline simulation using the complete local EI, 2) Simulation with only on-road vehicular emissions (Local EI(v)), and 3) Simulation including only point-source industrial emissions (Local EI(i)).  $\text{O}_3$  profiles obtained with only vehicular emissions follow the same pattern as the baseline simulation, with equivalent  $\text{O}_3$  peaks and the same diurnal distribution. On the other hand, results obtained with only industrial point-sources were characterized by a constant  $\text{O}_3$  distribution similar to that one obtained in rural zones where the background concentration prevailed. The minor effect of industrial point-source emissions in  $\text{O}_3$  dynamics is supported by its low emission contribution compared with emission fluxes from on-road vehicular sources. According to González et al. (2017), production of  $\text{O}_3$  precursors from on-road vehicular sources were in order of 9.6 Gg/yr of  $\text{NMVOC}$ , 4.9 Gg/yr of  $\text{NO}_x$  and 43.4 Gg/yr of  $\text{CO}$ ; while industrial point-source emissions only emitted 0.004 Gg/yr of  $\text{NMVOC}$ , 0.089 Gg/yr of  $\text{NO}_x$  and 0.22 Gg/yr of  $\text{CO}$ . These results suggest that air pollution policies in the city for both prevention and control of  $\text{O}_3$  and its precursors should be focused initially on vehicular sources management. The continuous growth of traffic density – increasing from 310 to 371 vehicles per 1000 inhabitants between 2013 and 2015 (Manizales Como Vamos, 2013; 2016) – in a city characterized by its reduced expansion areas as a consequence of its complex topography, requires the implementation of vehicle emission control strategies.



**Figure 6.** Simulated mean hourly concentrations of O<sub>3</sub> (right) and NO<sub>2</sub> (left) in the 1 km modelling domain (D4), using global emission inputs from the EDGAR-HTAP database.



**Figure 7. Simulated mean hourly concentrations of  $\text{O}_3$  (right) and  $\text{NO}_2$  (left) in the 1 km modelling domain (D4), using emissions inputs from the local EI estimated in Manizales.**



**Figure 8.** Observed and simulated mean hourly concentrations of  $O_3$  in the 1 km modelling domain (D4), for three different emission scenarios: 1) Both on-road vehicular and point-source industrial emissions (Local EI(v+i)), 2) only on-road vehicular emissions (Local EI(v)), and 3) only point-source industrial emissions (Local EI(i)).

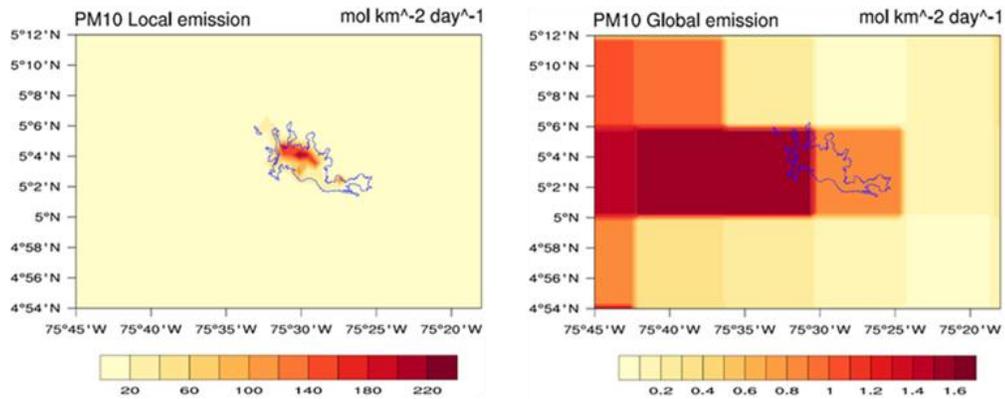
#### *3.4. Differences of using local and global EIs on $PM_{10}$ concentrations and analysis of local emissions contribution.*

Representation of ambient  $PM_{10}$  concentrations in Manizales from WRF-Chem simulations was significantly improved using local  $PM_{10}$  emission fluxes. Table 6 shows the observed daily mean  $PM_{10}$  concentrations measured at five stations in the city, as well as the comparison with modeling results obtained in the two days with field data (July 1 and July 4 of 2015). The comparison was performed for two simulation cases, the first using the global EDGAR-HTAP database and a second case using the local EI. Overall,  $PM_{10}$  predictions were relatively close to observations when the local EI was included in the simulation, mainly in stations located around the geographic center (PAL station) and west (downtown stations: GOB and LIC) of the urban area, as these stations are characterized by the influence of traffic emissions. An underestimation pattern was observed in stations located at east of the city (MIL and NUB). Performance statistics obtained for the complete data (all stations combined) supported the accuracy of predicted concentrations, with values of  $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (MGE) and  $11.5 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (RMSE). On the other hand, predictions obtained with the global emission database (EDGAR-HTAP) were highly underestimated in all monitoring stations, with performance statistic almost three times higher than those obtained with the local EI (MGE =  $28 \mu\text{g}/\text{m}^3$  and RMSE =  $28.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ).  $PM_{10}$  metrics reported by Kumar et al. (2016), who used global emission inputs in WRF-Chem simulations over Bogotá, Colombia, were  $39$  and  $48 \mu\text{g}/\text{m}^3$  for MGE and RMSE, respectively. These performance statistics are similar to those obtained in Manizales using the EDGAR-HTAP database. The authors also reported an underestimation of  $PM_{10}$  concentrations, highlighting the importance of using local emission information for future simulations in order to improve the representation of this pollutant in the urban area of this Latin American megacity.

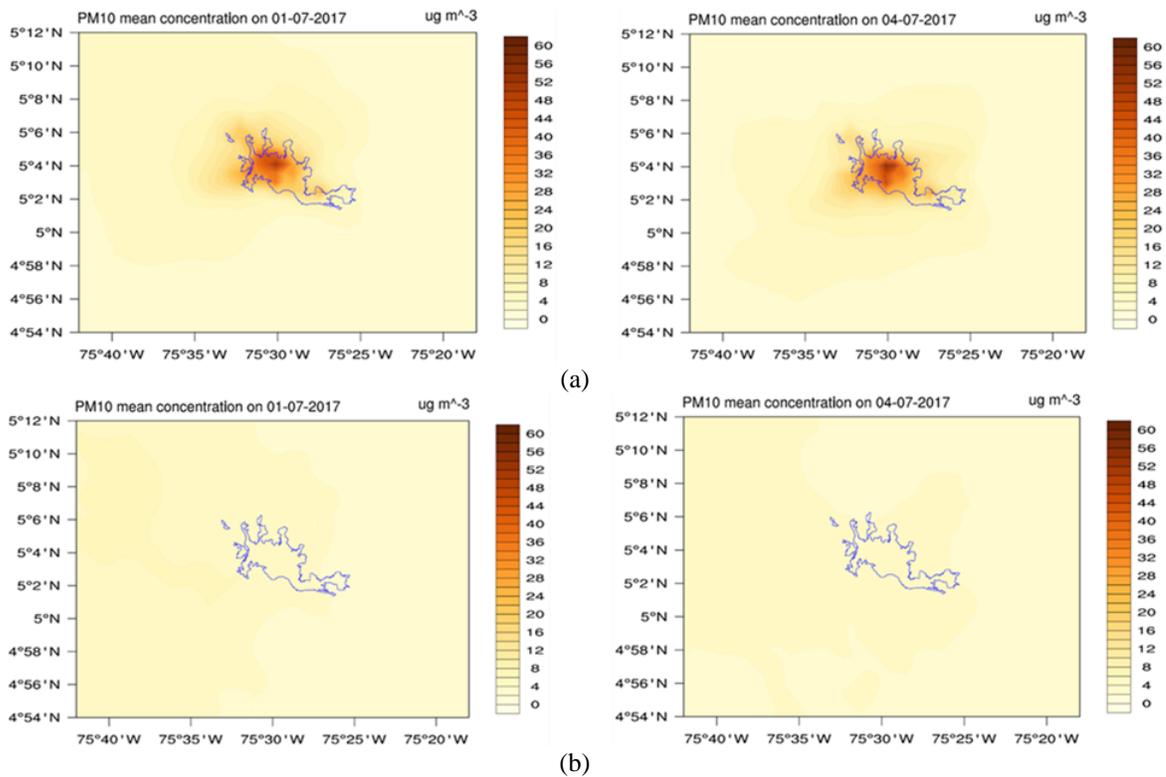
**Table 6. Comparison of observed and predicted daily mean PM<sub>10</sub> concentrations in Manizales using the local EI and global EDGAR-HTAP emissions. Simulation results using only local on-road vehicular fluxes are included.**

PM <sub>10</sub> station	Date (d/m/y)	Daily mean PM <sub>10</sub> concentration (µg/m <sup>3</sup> )			
		Observed	Sim. Local EI	Sim. only on-road vehicular EI	Sim. Global EI (EDGAR-HTAP)
GOB	01-7-2017	24	45	44	5.1
	04-7-2017	31	34	33	4.1
LIC	01-7-2017	37	41	41	4.7
	04-7-2017	46	32	31	4.2
PAL	01-7-2017	36	29	27	4.5
	04-7-2017	27	33	32	4.4
MIL	01-7-2017	29	19	16	4.3
	04-7-2017	35	24	21	5.1
NUB	01-7-2017	36	18	13	4.3
	04-7-2017	26	20	14	5.1

Differences obtained between these two test cases (Local EI and EDGAR-HTAP) in Manizales can be explained by differences in both, quantity and allocation of emission inputs. As shown in Fig. 9, the use of the high-resolution local EI allowed a more realistic representation of hotspot areas of PM<sub>10</sub> emissions, mainly in zones influenced by high traffic such as downtown and nearby residential-commercial areas of the city. This improvement is finally represented in simulation results. Fig. 10 shows the spatial distributions of daily mean PM<sub>10</sub> concentrations, comparing them with values obtained for the two emission scenarios (for those days with available field measurements). Maps were zoomed for showing the urban area of Manizales and nearby rural zones. Results obtained with the local EI (Fig. 10a) show that PM<sub>10</sub> pollution was concentrated mainly in the urban area, conserving similar hotspots than those coming from the emission fluxes distribution. Although the WRF-Chem model tends to overestimate wind velocity in Manizales, predicted surface winds remain relatively low – not exceeding maximum values of 4 m/s. This result suggests that dynamics of PM<sub>10</sub> pollution in the city was controlled by local effects with little dispersion outside the urban area and with zones of high concentrations influenced mainly by nearby pollution sources. The separately simulations for evaluating the effect of on-road vehicular and industrial point-source emissions on PM<sub>10</sub> air quality, shown that on-road vehicular sources explained around 96% of simulated baseline concentration (Table 6), mainly in downtown and the geographic center of the city (GOB, LIC and PAL stations). In those stations located at east (MIL and NUB), the contribution of vehicular sources explained a high percentage of PM<sub>10</sub> concentrations (around 78 %), but were lower than that obtained in high-traffic areas. However, at these stations the model predicted much lower concentrations during the two days of analysis (compared with observations), suggesting a possible underestimation of PM<sub>10</sub> vehicular emissions in the local EI for eastern regions of the city. This result highlights the importance of including additional PM emission sources in the EI. Different studies, not only in Colombia (Beltrán et al., 2012; Méndez et al., 2017; Pérez-Peña et al., 2017), but also in other cities around the world (Amato et al., 2011), have recognized the importance of non-exhaust vehicular emissions, from processes such as resuspension of particulate matter (e.g. PM resuspension from paved and unpaved roads, and wear of brakes and tires). In that sense, this emission source should be analyzed for future EI updates in the city.



**Figure 9. Distribution of PM<sub>10</sub> emission fluxes scaled into D4 domain for WRF-Chem simulations. Emission inputs are shown for the Local EI (left) and the global EDGAR-HTAP database (right). Maps are zoomed to show Manizales urban area (blue shape) and nearby rural zones.**



**Figure 10. Simulated daily mean PM<sub>10</sub> concentrations in the 1 km modelling domain (D4) during July 1 (left) and July 4 (right), using emissions inputs from: a) The local EI estimated in Manizales. b) EDGAR-HTAP database. Maps are zoomed to show Manizales urban area (blue shape) and nearby rural zones.**

#### 4. Conclusions

The use of local emission fluxes in a high-resolution WRF-Chem simulation allowed significant improvements in representing O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> dynamics over the medium-sized Andean city of Manizales, Colombia. Results here obtained highlight the importance of estimating and improving

local EIs in medium-sized cities. Local EI used in this study allowed a more realistic analysis of emission representation, which in turn led to a better understanding of both dispersion and transformation of air pollutants over Manizales. Results from a one-week dry simulation period in Manizales showed a good agreement between predictions and observations. In the case of O<sub>3</sub> hourly concentrations, values of MGE, RMSE and r coefficient were 7.6 ppb, 8.8 ppb, and 0.81 respectively, a better performance than those obtained when global emission datasets were used. For example, metrics obtained with the EDGAR-HTAP database were in order of 11.6 ppb, 13.9 ppb and 0.64 for MGE, RMSE and r, respectively. A similar pattern was obtained analyzing the complete data (all stations combined) of PM<sub>10</sub> daily mean concentrations. Values of 10 and 11.5 µg/m<sup>3</sup> for MGE and RMSE respectively, were calculated using local emission fluxes, while the simulation with EDGAR-HTAP database produced lower PM<sub>10</sub> concentrations, confirmed by values of the performance metrics MGE (28 µg/m<sup>3</sup>) and RMSE (28.8 µg/m<sup>3</sup>). Overall, the model captured reasonably well the diurnal variation of T and RH. Major differences were obtained in representation of wind speed, overestimated mainly at west and geographic center of the city. In spite of the overall accuracy of the model, simulations were characterized by underestimation of O<sub>3</sub> peaks and underestimation of PM<sub>10</sub> concentrations towards east of the city. Improvements in the local EI, the use of more accurate static data for refining unresolved topographic features, as well as the inclusion of additional field measurements of variables such as PBL height, NO<sub>x</sub>, NMVOC and CO surface concentrations, could give additional bases for explaining these inconsistencies. Hence, further studies are needed for improving the results obtained during this first simulation exercise in Manizales.

Analysis of the relative impact of anthropogenic emissions suggests that PM<sub>10</sub> levels and ozone chemistry in the urban area of Manizales were controlled by emissions of their precursors from on-road vehicular sources. Diurnal cycle of O<sub>3</sub> production and depletion was generated mainly in the urban area of Manizales, associated entirely to NO<sub>x</sub> and NMVOC vehicular emissions. Furthermore, vehicles contributed with almost 96% of simulated PM<sub>10</sub> concentrations in zones with high influence of traffic (downtown and geographic center of the city). This result emphasizes that air pollution policies in the city for both prevention and control should be focused mainly on vehicular emission abatement strategies. Results obtained in this study also provides a first insight about the application of a CTM for studying relative impacts of on-road vehicular and point-source industrial emissions on O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> pollution levels in Manizales. Furthermore, this study provided bases to understand how dynamics of transformation and dispersion of these pollutants influence the air quality of this mountainous ecosystem. Results can add a new information to previous air pollution studies in medium-sized Andean cities, providing bases to improve their air pollution management system and contribute to local public policy decisions.

## Acknowledgments

The authors acknowledge Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, and the Institute of Astronomy, Geophysics and Atmospheric Sciences at Universidade de São Paulo. The authors also acknowledge the financial support given by Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación (COLCIENCIAS) through “Programa Doctoral Crédito-Beca Colciencias 528”. Part of this work was conducted during the Sabbatical Fellow of Professor Beatriz Aristizábal, sponsored by Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales - Colombia.

## References

- Ackermann, I.J., Hass, H., Memmesheimer, M., Ebel, A. Binkowski, F.S., Shankar, U., 1998. Modal aerosol dynamics model for Europe: Development and first applications. *Atmos. Environ.* 32, 2981-2999.
- Alonso, M.F., Longo, K.M., Freitas, S.R., da Fonseca, R.M., Marécal, V., Pirre, M., Klenner, L.G., 2010. An urban emissions inventory for South America and its application in numerical modeling of atmospheric chemical composition at local and regional scales. *Atmos. Environ.* 44, 5072-5083. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.09.013>.

Andrade, M.F., Ynoue, R.Y., Freitas, E.D., Todesco, E., Vara-Vela, A., Ibarra, S., Martins, L.D., Martins, J.A., Carvalho, V.S.B., 2015. Air quality forecasting system for Southeastern Brazil. *Frontiers in Environmental Science*, 3, 1-14.

Arango, C.D., 2014. Identificación de patrones de circulación atmosférica en el Valle de Sogamoso y estimación de su impacto en la calidad del aire mediante un modelo meteorológico avanzado y análisis de trayectorias. In Spanish. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá. Bogotá D.C., Colombia. Available online at: <http://www.bdigital.unal.edu.co/46490/1/01194143.2014.pdf>. Accessed January 2017 (Master Thesis).

Arango, C., Ruiz, J.F., n.d. Implementación del modelo WRF para la sabana de Bogotá. In Spanish. Available online at: [http://www.ideam.gov.co/documents/21021/21132/Modelo\\_WRF\\_Bogota.pdf/f1d34638-e9f8-4689-b5f4-31957c231c46](http://www.ideam.gov.co/documents/21021/21132/Modelo_WRF_Bogota.pdf/f1d34638-e9f8-4689-b5f4-31957c231c46). Accessed May 2016.

Arellano, C., 2013. Condições meteorológicas e níveis de poluição na Região Metropolitana de Lima – Perú. Universidad de Sao Paulo. Sao Paulo, Brasil. In Portuguese. Available online at: [http://www.iag.usp.br/pos/sites/default/files/d\\_cynthia\\_s\\_a\\_rojas\\_corrigida.pdf](http://www.iag.usp.br/pos/sites/default/files/d_cynthia_s_a_rojas_corrigida.pdf). Accessed February 2017 (Master Thesis).

Borge, R., Alexandrov, V., del Vas, J.J., Lumbreras, J., Rodríguez, E., 2008. A comprehensive sensitivity analysis of the WRF model for air quality applications over the Iberian Peninsula. *Atmos. Environ.* 42, 8560–8574. doi:10.1016/j.atmosenv.2008.08.032.

Borge, R., Lumbreras, J., Pérez, J., de la Paz, D., Vedrenne, M., de Andrés, J.M., Rodríguez, M.E., 2014. Emission inventories and modeling requirements for the development of air quality plans. Application to Madrid (Spain). *Sci. Total Environ.* 466–467, 809–819. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.07.093>.

Butler, T.M., Lawrence, M.G., Gurjar, B.R., van Aardenne, J., Schultz, M., Lelieveld, J., 2008. The representation of emissions from megacities in global emission inventories. *Atmos. Environ.* 42, 703–719. doi:10.1016/j.atmosenv.2007.09.060.

Carslaw, D.C., K. Ropkins, 2012. openair – an R package for air quality data analysis. *Environmental Modelling & Software* 27-28, 52–61.

Chen, E., Dudhia, J., 2001. Coupling an advanced land-surface/hydrology model with the Penn State/NCAR MM5 modeling system, Part 1: Model description and implementation. *Mon. Weather Rev.* 129: 569–585. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(2001\)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(2001)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2).

Cremades, P.G., Fernández, R.P., Allende, D.G., Mulena, G.C., Puliafito, S.E., 2017. High resolution satellite derived erodibility factors for WRF/Chem windblown dust simulations in Argentina. *Atmósfera* 30, 11-25. doi: 10.20937/ATM.2017.30.01.02.

Cuchiara, G.C., Li, X., Carvalho, J., Rappenglück, B., 2014. Intercomparison of planetary boundary layer parameterization and its impacts on surface ozone concentration in the WRF/Chem model for a case study in Houston/Texas. *Atmos. Environ.* 96, 175-185. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.07.013>.

Cuesta, A.P., González, C.M., Velasco, M., Aristizábal, B.H., 2017. Distribución espacial de concentraciones de SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> y O<sub>3</sub> en el aire ambiente de Manizales. In Spanish. Manuscript accepted in *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*.

Da Silva, R.S., Andrade, M.F., 2013. Validação de poluentes fotoquímicos e inclusão do inventário de emissões no modelo de qualidade do ar wrf/chem, para a Região Metropolitana de São Paulo. In Portuguese. *Revista Brasileira de Meteorologia* 28, 105 – 121.

D'Angiola, A., Dawidowski, L.E., Gómez, D.R., Osses, M., 2010. On-road traffic emissions in a megacity. *Atmos. Environ.* 44, 483-493. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.11.004>.

Emmons, L.K., Walters, S., Hess, P.G., Lamarque, J.-F., Pfister, G.G., Fillmore, D., Granier, C., Guenther, A., Kinnison, D., Laepple, T., Orlando, J., Tie, X., Tyndall, G., Wiedinmyer, C., Baughcum, S.L., Kloster, S., 2010. Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4). *Geosci. Model Dev.* 3, 43–67. doi:10.5194/gmd-3-43-2010.

Fast, J.D., Gustafson, W.I., Easter, R.C., Zaveri, R.A., Barnard, J.C., Chapman, E.G., Grell, G.A., Peckham, S.E., 2006. Evolution of ozone, particulates, and aerosol direct radiative forcing in the vicinity of Houston using a fully coupled meteorology-chemistry-aerosol module. *J. Geophys. Res.*, 111, D21305. doi:10.1029/2005JD006721.

Fernández, R., Cremades, P., Allende, D., Puliafito, S., 2010. Sensitivity analysis of the spatial and altitude distributions of pollutants using the Weather Research and Forecasting Model with Chemistry (Wrf/Chem). *Mecánica Computacional* 29, 8087-8108.

Franco, J.F., 2012. Contaminación atmosférica en centros urbanos. Desafío para lograr su sostenibilidad: caso de estudio Bogotá. In Spanish. *Revista EAN* 72, 193-204. Available online at:

[http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0120-81602012000100013&lng=en&tlng=es](http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0120-81602012000100013&lng=en&tlng=es). Accessed February 2017.

Freitas, S.R., Longo, K.M., Chatfield, R., Latham, D., Silva Dias, M.A.F., Andreae, M.O., Prins, E., Santos, J.C., Gielow, R., Carvalho Jr., J.A., 2007. Including the sub-grid scale plume rise of vegetation fires in low resolution atmospheric transport models. *Atmos. Chem. Phys.* 7, 3385–3398.

Freitas, S.R., Longo, K.M., Silva Dias, M.A.F., Chatfield, R., Silva Dias, P., Artaxo, P., Andreae, M.O., Grell, G., Rodrigues, L.F., Fazenda, A., Panetta, J., 2009. The Coupled Aerosol and Tracer Transport model to the Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System (CATT-BRAMS) – Part 1 : Model description and evaluation. *Atmos. Chem. Phys.* 9, 2843-2861.

Freitas, S.R., Longo, K.M., Alonso, M.F., Pirre, M., Marecal, V., Grell, G., Stockler, R., Mello, R.F., Spanchez-Gácita, M., 2011. PREP-CHEM-SRC – 1.0: a preprocessor of trace gas and aerosol emission fields for regional and global atmospheric chemistry models. *Geosci. Model Dev.* 4, 419–433. doi:10.5194/gmd-4-419-2011.

Ginoux, P., Chin, M., Tegen, I., Prospero, J.M., Holben, B., Dubovik, O., Lin, S.-J., 2001. Sources and distributions of dust aerosols simulated with the GOCART model. *J. Geophys. Res.* 106, 20255–20273.

González, C.M., Cortés, J., Aristizábal, B.H., 2015. Influence of meteorology and source variation on airborne PM<sub>10</sub> levels in a high relief tropical Andean city. *Rev. Fac. Ing. Univ. Antioquia* 74, 200-212.

González, C.M., Gómez, C.D., Rojas, N.Y., Acevedo, H., Aristizábal, B.H., 2017. Relative impact of on-road vehicular and point-source industrial emissions of air pollutants in a medium-sized Andean city. *Atmos. Environ.* 152, 279-289. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.12.048>.

Gómez, C.D., González, C.M., Osses, M., Aristizábal, B.H. Spatial and temporal disaggregation of the on-road vehicle emission inventory in a medium-sized Andean city. Comparison of GIS-based top-down methodologies. Manuscript under revision in *Atmos. Environ. Journal*.

Gunwani, P., Mohan, M., 2017. Sensitivity of WRF model estimates to various PBL parameterizations in different climatic zones over India. *Atmospheric Research* 194, 43–65. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosres.2017.04.026>.

Dudhia J., 1989. Numerical study of convection observed during the Winter Monsoon Experiment using a mesoscale two-dimensional model. *J. Atmos. Sci.* 46, 3077–3107. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1989\)046<3077:NSOCOD>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1989)046<3077:NSOCOD>2.0.CO;2).

Grell, G.A., Peckham, S.E., Schmitz, R., McKeen, S.A., Frost, G., Skamarock, W.C., Eder, B., 2005. Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. *Atmos. Environ.* 39, 6957-6975. doi:10.1016/j.atmosenv.2005.04.027.

Grell, G., Baklanov, A., 2011. Integrated modeling for forecasting weather and air quality: A call for fully coupled approaches. *Atmos. Environ.* 45, 6845-6851. doi:10.1016/j.atmosenv.2011.01.017.

Grell, G.A., Freitas, S.R., 2014. A scale and aerosol aware stochastic convective parameterization for weather and air quality modeling. *Atmos. Chem. Phys.* 14, 5233–5250. doi:10.5194/acp-14-5233-2014.

Guenther, A., Karl, T., Harley, P., Wiedinmyer, C., Palmer, P.I., Geron, C., 2006. Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature). *Atmos. Chem. Phys.* 6, 3181–3210.

Gurjar, B.R., van Aardenne, J.A., Lelieveld, J., Mohan, M., 2004. Emission estimates and trends (1990-2000) for megacity Delhi and implications *Atmos. Environ.* 38, 5663-5681.

Hariprasad, K.B.R.R., Srinivas, C.V., Singh, A.B., Rao, S.V.B., Baskaran, R., Venkatraman, B., 2014. Numerical simulation and intercomparison of boundary layer structure with different PBL schemes in WRF using experimental observations at a tropical site *Atmos. Res.* 145–146, 27–44. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosres.2014.03.023>.

Hong, S., Lim, J.J., 2006. The WRF Single-Moment 6-Class Microphysics Scheme (WSM6). *Journal of the Korean Meteorological Society* 42, 129-151.

Hoshyaripour, G., Brasseur, G., Andrade, M.F., Gavidia-Calderón, M., Bouarar, I., Ynoue, R.Y., 2016. Prediction of ground-level ozone concentration in São Paulo, Brazil: Deterministic versus statistic models. *Atmos. Environ.* 145, 365-375. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.09.061>.

Hu, X., Nielsen-Gammon, J.W., Zhang, F., 2010. Evaluation of Three Planetary Boundary Layer Schemes in the WRF Model. *J. Appl. Meteorol.* 49, 1831-1844. doi: 10.1175/2010JAMC2432.1.

Janjić, Z.I., 2001. Nonsingular Implementation of the Mellor-Yamada Level 2.5 Scheme in the NCEP Meso model. National Centers for Environmental Prediction (NCEP), Office Note #437. Available online at: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.459.5434&rep=rep1&type=pdf>. Accessed March 2017.

Jiménez, J.F., 2016. Altura de la Capa de Mezcla en un área urbana, montañosa y tropical. Caso de estudio: Valle de Aburrá (Colombia). Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia. In Spanish. Available online at: <http://bibliotecadigital.udea.edu.co/handle/10495/5738>. Accessed April 2017 (Ph.D. Thesis).

Karlsson, P.E., Klingberg, J., Engardt, M., Andersson, C., Langner, J., Karlsson, G.P., Pleijel, H., 2017. Past, present and future concentrations of ground-level ozone and potential impacts on ecosystems and human health in northern Europe. *Sci. Total Environ.* 576, 22–35. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.10.061>.

Kumar, A., Rincón, A., Rojas, N., 2014. Application of WRF-Chem model to simulate ozone concentration over Bogotá. 13th Annual CMAS Conference Archive. Chapel Hill, NC. Available online at: [https://www.cmascenter.org/conference/2014/abstracts/anikender\\_kumar\\_application\\_wrf-chem\\_2014.pdf](https://www.cmascenter.org/conference/2014/abstracts/anikender_kumar_application_wrf-chem_2014.pdf). Accessed April 2017.

Kumar, A., Jiménez, R., Belalcázar, L.C., Rojas, N.Y., 2016. Application of WRF-Chem Model to Simulate PM<sub>10</sub> Concentration over Bogotá. *Aerosol Air. Qual. Res.* 16, 1206–1221. doi: 10.4209/aaqr.2015.05.0318.

Longo, K.M., Freitas, S.R., Andreae, M.O., Setzer, A., Prins, E., Artaxo, P., 2010. The Coupled Aerosol and Tracer Transport model to the Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System (CATT-BRAMS) – Part 2: Model sensitivity to the biomass burning inventories. *Atmos. Chem. Phys.* 10, 5785–5795.

Longo, K.M., Freitas, S.R., Pirre, M., Marécal, V., Rodrigues, L.F., Panetta, J., Alonso, M.F., Rosário, N.E., Moreira, D.S., Gácita, M.S., Arteta, J., Fonseca, R., Stockler, R., Katsurayama, D.M., Fazenda, A., Bela, M., 2013. The chemistry CATT-BRAMS model (CATT-BRAMS 4.5): a regional atmospheric model system for integrated air quality and weather forecasting and research. *Geosci. Model Dev.* 6, 1173-1222. doi:10.5194/gmdd-6-1173-2013.

Manizales Cómo Vamos, 2013. Informe de calidad de vida Manizales. In Spanish. Available online at: [http://manizalescomovamos.org/?page\\_id=2278](http://manizalescomovamos.org/?page_id=2278). Accessed February 2016.

Manizales Cómo Vamos, 2016. Informe de calidad de vida Manizales 2016. In Spanish. Available online at: <http://manizalescomovamos.org/5151/>. Accessed November 2016.

Mlawer, E.J., Taubman, S.J., Brown, P.D., Iacono, M.J., Clough, S.A., 1997. Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave. *J. Geophys. Res.* 102, 16663–16682.

Muñoz, A.G., López, P., Velásquez, R., Monterrey, L., León, G., Ruiz, F., Recalde, C., Cadena, J., Mejía, R., Paredes, M., Bazo, J., Reyes, C., Carrasco, G., Castellón, Y., Villarroel, C., Quintana, J., Urdaneta, A., 2010. An Environmental Watch System for the Andean Countries: El Observatorio Andino. *B. Am. Meteorol. Soc.*, 91, 1645–1652.

Muñoz, A.G., Ruiz-Carrascal, D., Ramírez, P., León, G., Quintana, J., Bonilla, A., Torres, W., Pastén, M., and Sánchez, O., 2012. Risk Management at the Latin American Observatory. *Risk Management – Current Issues and Challenges*, InTech Publications. 533–556. doi:10.5772/50788.

National Center for Environmental Prediction / National Weather Service / NOAA / U.S. Department of Commerce, European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, and Unidata / University Corporation for Atmospheric Research, 2003. Historical Unidata Internet Data Distribution (IDD) Gridded Model Data. Research Data Archive at the National Center for Atmospheric Research, Computational and Information Systems Laboratory. Available online at: <http://rda.ucar.edu/datasets/ds335.0/>. Accessed April 2016.

Nedbor-Gross, R., Henderson, B.H., Davis, J.R., Baublitz, C., Pachón, J.E., Rincón, A., Galvis, B., 2014. Implementation of a WRF-CMAQ Air Quality Modeling System in Bogotá, Colombia. 13th Annual CMAS Conference Archive. Chapel Hill, NC. Available online at <https://www.cmascenter.org/conference/2014/agenda.cfm>. Accessed March 2017.

Nedbor-Gross, R., Henderson, B.H., Pérez-Peña, M.P., Pachón, J.E., 2017. Air quality modeling in Bogotá, Colombia using local emissions and natural mitigation factor adjustment for re-suspended particulate matter. *Atmos. Pollut. Res.* In Press. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apr.2017.07.004>.

Park, D., Oh, M., Yoon, Y., Park, E., Lee, K., 2012. Source identification of PM<sub>10</sub> pollution in subway passenger cabins using positive matrix factorization. *Atmos Environ.* 49, 180-185. doi:10.1016/j.atmosenv.2011.11.064.

Pleim, J.E., 2007. A Combined Local and Nonlocal Closure Model for the Atmospheric Boundary Layer. Part I: Model Description and Testing. *J. Appl. Meteorol.* 46, 1383-1395. doi: 10.1175/JAM2539.1.

Rincón, M.A., 2015. Simulación regional de contaminantes atmosféricos para la Ciudad de Bogotá. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá. Bogotá D.C., Colombia. Available online at: <http://www.bdigital.unal.edu.co/51092/> Accessed March 2017 (Master Thesis).

Ritter, M., Müller, M.D., Tsai, M., Parlow, E., 2013. Air pollution modeling over very complex terrain: An evaluation of WRF-Chem over Switzerland for two 1-year periods. *Atmos. Res.* 132–133, 209–222.

- Saide, P.E., Carmichael, G.R., Spak, S.N., Gallardo, L., Osses, A.E., Mena-Carrasco, M.A., Pagowski, M., 2011. Forecasting urban PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> pollution episodes in very stable nocturnal conditions and complex terrain using WRF-Chem CO tracer model. *Atmos Environ.* 45, 2769-2780. doi:10.1016/j.atmosenv.2011.02.001.
- Schell B., Ackermann, I.J., Hass, H., Binkowski, F.S., Ebel, A., 2001. Modeling the formation of secondary organic aerosol within a comprehensive air quality model system. *J. Geophys. Res.* 106, 28275-28293.
- Seinfeld, J.H., Pandis, S.N., 2006. *Atmospheric chemistry and physics: From air pollution to climate change*. John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, New Jersey.
- Skamarock, W.C., Klemp, J.B., 2008. A time-split nonhydrostatic atmospheric model for weather research and forecasting applications. *J. Comput. Phys.* 227, 3465-3485. doi:10.1016/j.jcp.2007.01.037.
- Schürmann, G.J., Algieri, A., Hedgecock, I.M., Manna, G., Pirrone, N., Sprovieri, F., 2009. Modelling local and synoptic scale influences on ozone concentrations in a topographically complex region of Southern Italy. *Atmos Environ.* 43, 4424-4434. doi:10.1016/j.atmosenv.2009.06.017.
- Stockwell, W.R., Middleton, P., Chang, J.S., 1990. The Second Generation Regional Acid Deposition Model Chemical Mechanism for Regional Air Quality Modeling. *J. Geophys. Res.* 95, 16343-1616367.
- Talgo, K. Bowden, J. Adelman, Z., Morris, R., 2015 Western Air Quality Study (WAQS). Weather Research Forecast (WRF) Meteorological Model Draft Modeling Protocol 2014 Modeling Year. Available online at: [http://vibe.cira.colostate.edu/wiki/Attachments/Modeling/WAQS\\_2014\\_WRF\\_Modeling\\_Protocol\\_Draft\\_04Sep2015.docx](http://vibe.cira.colostate.edu/wiki/Attachments/Modeling/WAQS_2014_WRF_Modeling_Protocol_Draft_04Sep2015.docx) Accessed June 2016.
- Taylor, K.E.: Summarizing multiple aspects of model performance in a single diagram. *J. Geophys. Res.* 106, 7183-7192. doi:10.1029/2000JD900719, 2001.
- Toro, M.V., Cremades, L.V., Calbó, J., 2006. Relationship between VOC and NO<sub>x</sub> emissions and chemical production of tropospheric ozone in the Aburrá Valley (Colombia). *Chemosphere* 65, 881-888. doi:10.1016/j.chemosphere.2006.03.013.
- Tuccella, P., Curci, G., Visconti, G., Bessagnet, B., Menut, L., Park, R.J., 2012. Modeling of gas and aerosol with WRF/Chem over Europe: Evaluation and sensitivity study. *J. Geophys. Res.* 117, D03303. doi:10.1029/2011JD016302.
- UN (United Nations), 2014. *World Urbanization Prospects: The 2014 Revision, Highlights*. Department of Economic and Social Affairs, Population Division. New York.
- Vara-Vela, A., Muñoz, A.G., Lomas, A., 2011. OLE2-AAS4WRF: OLE2's Another Assimilation System for WRF\_Chem. Observatorio Latinoamericano de Eventos Extraordinarios (OLE2). Available online at: [http://www.cmc.org.ve/mediawiki/index.php?title=Calidad\\_de\\_Aire](http://www.cmc.org.ve/mediawiki/index.php?title=Calidad_de_Aire) Accessed May 2016.
- Vara-Vela, A., Andrade, M.F., Kumar, P., Ynoue, R.Y., Muñoz, A.G., 2016. Impact of vehicular emissions on the formation of fine particles in the Sao Paulo Metropolitan Area: a numerical study with the WRF-Chem model. *Atmos. Chem. Phys.* 16, 777-797. doi:10.5194/acp-16-777-2016.
- Wang, N., Guo, H., Jiang, F., Ling, Z.H., Wang, T., 2015. Simulation of ozone formation at different elevations in mountainous area of Hong Kong using WRF-CMAQ model. *Sci. Total Environ.* 505, 939-951. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2014.10.070>.
- Wang, T., Xue, L., Brimblecombe, P., Lam, Y.F., Li, L., Zhang, L., 2017. Ozone pollution in China: A review of concentrations, meteorological influences, chemical precursors, and effects. *Sci. Total Environ.* 575, 1582-1596. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.10.081>.
- Zárate, E., Belalcázar, L.C., Clappier, A., Manzi, V., Van den Bergh, H., 2007. Air quality modelling over Bogota, Colombia: Combined techniques to estimate and evaluate emission inventories. *Atmos Environ.* 41, 6302-6318. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.03.011>.
- Zhang, L., Jin, L., Zhao, T., Yin, Y., Zhu, B., Shan, Y., Guo, X., Tan, C., Gao, J., Wang, H., 2015. Diurnal variation of surface ozone in mountainous areas: Case study of Mt. Huang, East China. *Sci. Total Environ.* 538, 583-590. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.08.096>.

### 3.4.3. MODELIZACIÓN NUMÉRICA DEL CONTAMINANTE SO<sub>2</sub> EN LA CIUDAD DE MANIZALES. ANÁLISIS DEL IMPACTO DE EMISIONES ANTROPOGÉNICAS Y VOLCÁNICAS

Las fuentes antropogénicas (móviles en ruta y estacionarias puntuales) y la emisión de gases del volcán Nevado del Ruiz, se podrían considerar como los principales contribuyentes a la emisión de SO<sub>2</sub> en la zona de estudio, y por ende, las fuentes de mayor influencia en la dinámica de SO<sub>2</sub> sobre la ciudad de Manizales y sus áreas aledañas. En este sentido, el análisis de los resultados obtenidos en la simulación de la dispersión de SO<sub>2</sub> sobre Manizales, se realizó mediante la comparación de 4 casos de estudio tal como se muestra en la Tabla 3.5. El caso de estudio base, denominado *Evi-Evolc*, tiene en cuenta los dos tipos de emisiones: antropogénicas (móviles y estacionarias) y volcánicas. Como se indicó en la descripción metodológica, las simulaciones conservaron la misma configuración para la evaluación del periodo seco. Los únicos cambios se realizaron en la activación de las emisiones antropogénicas y/o volcánicas según el caso.

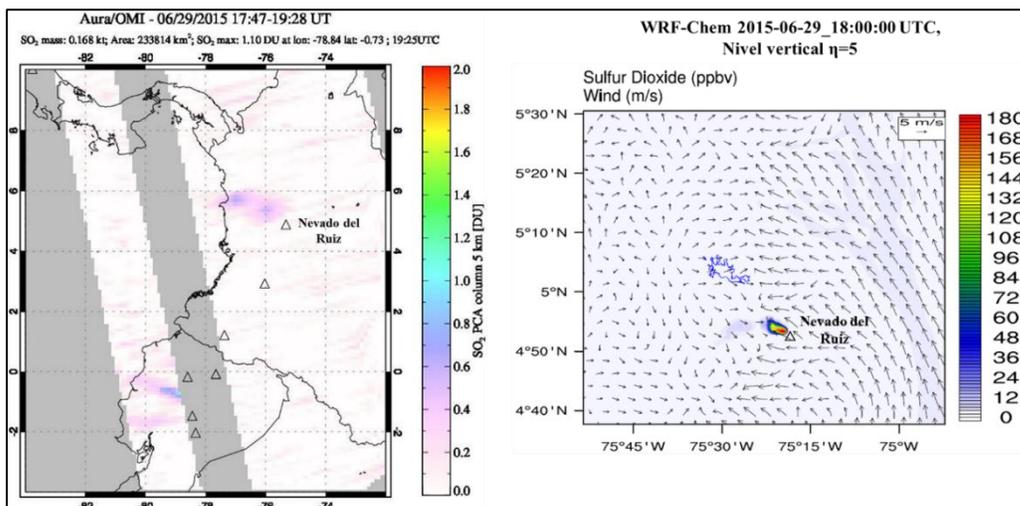
**Tabla 3.5. Características de las emisiones incluidas en las simulaciones realizadas en Manizales para análisis de la dinámica de dispersión de SO<sub>2</sub>.**

Identificación de la Simulación	Emisiones incluidas	Observaciones adicionales
Evi-Evolc	- Emisiones por fuentes móviles en ruta y estacionarias puntuales del inventario local. - Emisión de SO <sub>2</sub> del volcán Nevado del Ruiz	Simulación catalogada como caso base.
Evi	- Emisiones por fuentes móviles en ruta y estacionarias puntuales del inventario local.	Simulaciones adicionales para analizar diferencias con respecto al caso base. Útil en el análisis del posible impacto de cada emisión por separado.
Ev	- Emisiones por fuentes móviles en ruta del inventario local.	
Ei	- Emisiones por fuentes estacionarias puntuales del inventario local.	
Evolc	- Emisión de SO <sub>2</sub> del volcán Nevado del Ruiz	

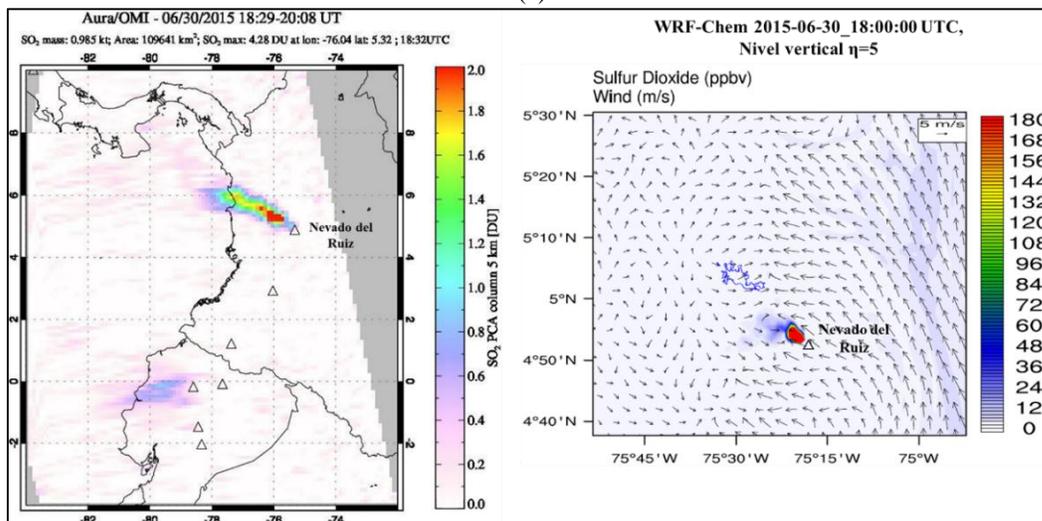
#### ***Representación de la dispersión de la pluma de emisión volcánica***

A partir de la simulación del caso base (*Evi-Evolc*) se realizó un primer análisis de la dirección de la dispersión de la emisión volcánica, con el fin de identificar si el modelo representa de forma correcta los patrones de dispersión de la pluma de emisión de SO<sub>2</sub>. Este análisis se realizó de forma cualitativa mediante la comparación de los resultados de WRF-Chem para concentración de SO<sub>2</sub> (dominio D4), y las imágenes del satélite EOS Aura (<https://aura.gsfc.nasa.gov/omi.html>). Las imágenes satelitales están asociadas específicamente al producto OMSO2 obtenido con el instrumento OMI (Ozone Monitoring Instrument) (<https://so2.gsfc.nasa.gov/>), mediante el cual se pueden obtener imágenes de la densidad vertical de la columna de SO<sub>2</sub> en unidades Dobson (DU, 1 DU = 2.69\*10<sup>16</sup> moléculas/cm<sup>2</sup>). La Figura 3.15 muestra la comparación entre las imágenes satelitales y la concentración de SO<sub>2</sub> obtenida con WRF-Chem en el nivel vertical  $\eta = 5$  (altura aproximada de 350 m a partir de la superficie del terreno). Las altas concentraciones obtenidas en este nivel permiten diferenciar más claramente la dirección de la dispersión de la pluma de emisión volcánica. Se observa como el modelo representa de forma correcta la dirección de la dispersión de la pluma de emisión durante los periodos con disponibilidad de información satelital (aproximadamente a las 18:00 horas UTC de cada día). Las direcciones predominantes de la pluma volcánica durante el periodo de simulación, se caracterizaron por movimientos de la columna gaseosa hacia el

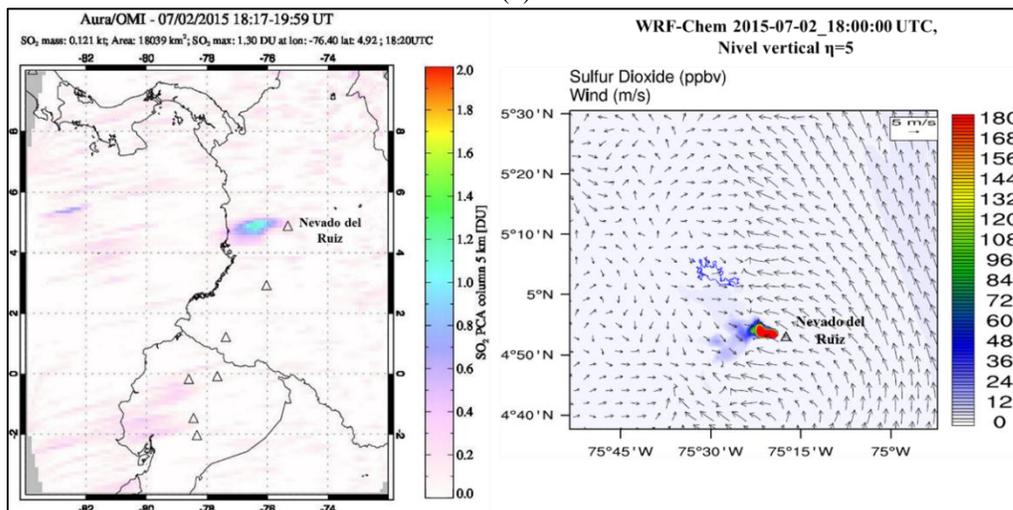
noroccidente (en dirección hacia la zona urbana de la ciudad de Manizales) y occidente del volcán Nevado del Ruiz.



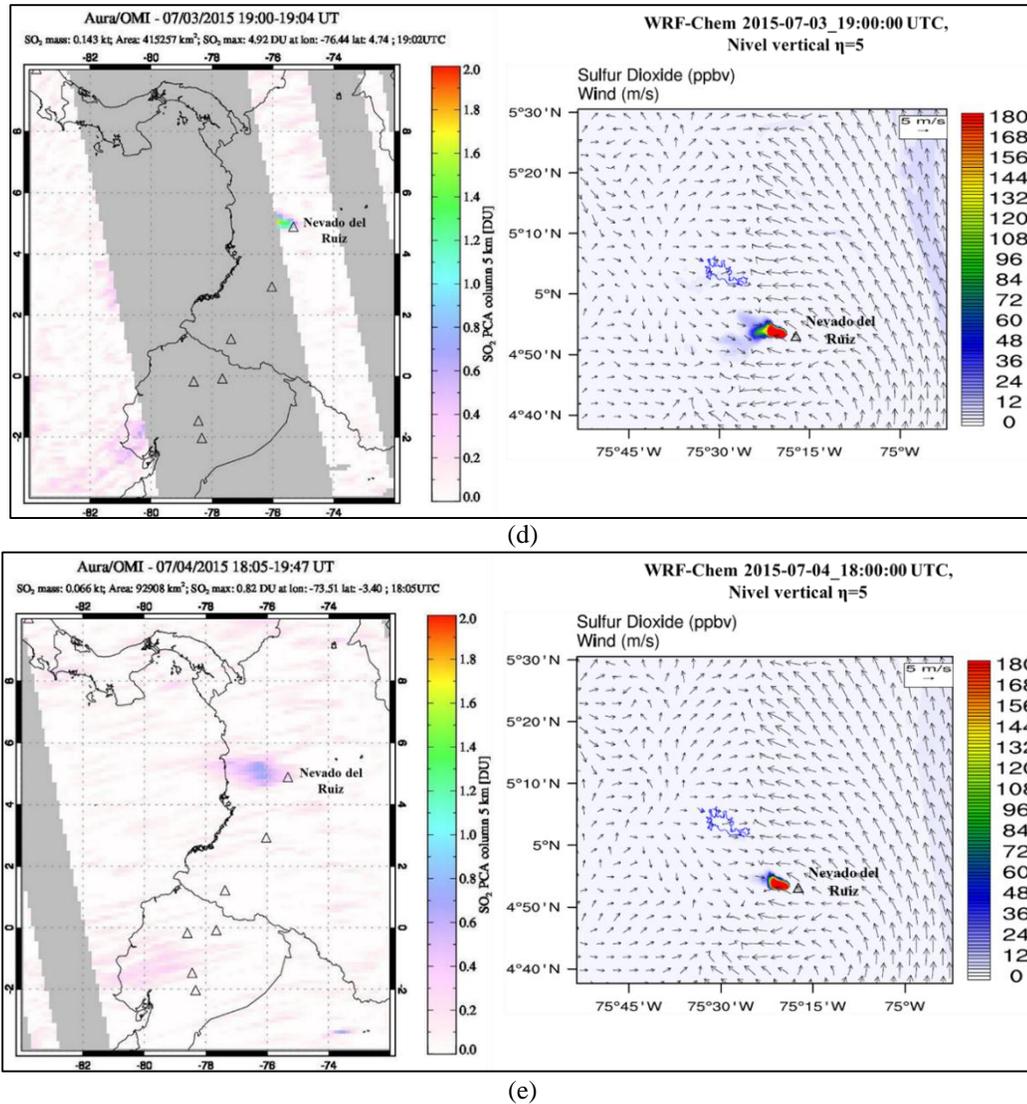
(a)



(b)



(c)



**Figura 3.15.** Patrones de dispersión de SO<sub>2</sub> registrados en las imágenes satelitales AURA/OMI (izquierda) y comparación con resultados de concentración de SO<sub>2</sub> obtenidos con WRF-Chem en el nivel vertical  $\eta = 5$ . a) Junio 29. b) Junio 30. c) Julio 2. d) Julio 3. e) Julio 4. Las imágenes satelitales fueron tomadas de <https://so2.gsfc.nasa.gov/>.

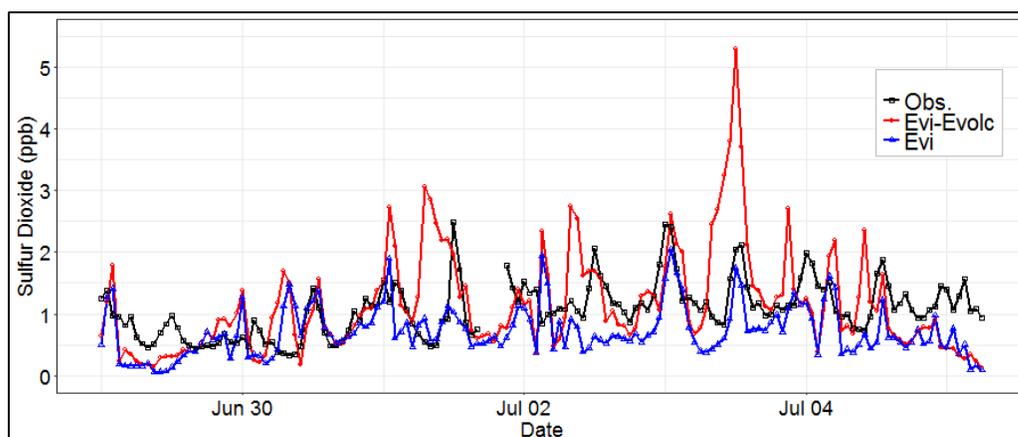
Este primer análisis permite concluir que el modelo WRF-Chem representa de forma correcta los patrones de dispersión, a nivel de mesoescala, de las emisiones volcánicas de SO<sub>2</sub>. Además, sugiere de forma inicial la posible influencia de las emisiones por desgasificación volcánica sobre la dinámica de SO<sub>2</sub> en la ciudad de Manizales.

**Perfiles horarios de SO<sub>2</sub> en superficie obtenidos en las simulaciones y comparación con datos observados**

La influencia de las emisiones de SO<sub>2</sub> (antropogénicas y volcánicas) sobre el área urbana de Manizales, fue analizada comparando los resultados obtenidos con WRF-Chem para concentración de SO<sub>2</sub> en superficie (nivel  $\eta = 1$ ), con los valores horarios de concentración de SO<sub>2</sub> medidos en la estación GOB. La Figura 3.16a muestra la comparación entre el caso base (que incluye las emisiones

antropogénicas y volcánicas) y la simulación realizada teniendo en cuenta únicamente la emisión antropogénica (*Evi*). No se observa una mejora significativa en la representación de los perfiles horarios de SO<sub>2</sub> cuando se incluyen las emisiones volcánicas en el modelo. Durante los primeros dos días de simulación (junio 29 y junio 30), se obtuvieron resultados similares con y sin la emisión volcánica, resultado que sugiere la influencia predominante de emisiones antropogénicas y los fenómenos de dispersión local sobre los niveles de SO<sub>2</sub> en el centro histórico de la ciudad (estación GOB). Para los siguientes días de simulación con el caso base (*Evi-Evolc*), el modelo registró algunos picos de concentración superiores a los registros observados, aumentando aún más los estadísticos de error entre la simulación y la observación. Estas diferencias pueden observarse claramente en el diagrama de Taylor de la Figura 3.17 y los estadísticos de error presentados en la Tabla 3.6. Con la simulación *Evi* se obtuvo una mayor correlación lineal y un menor error cuadrático medio ( $r = 0.4$ ; RMSE = 0.57 ppb), en comparación con los resultados del caso base, *Evi-Evolc* ( $r = 0.3$ ; RMSE = 0.81 ppb). La sobreestimación de los niveles de SO<sub>2</sub> en el caso base podría estar asociada a una posible subestimación de la altura de la pluma de emisión volcánica, teniendo en cuenta que en este estudio se asumió una altura de pluma promedio de 600 m según los reportes del SGC (2015). Asimismo, puede existir influencia de factores como la alta variabilidad de las emisiones volcánicas. Este aspecto va de la mano con la imposibilidad de medir de forma continua los flujos de emisión de gases provenientes del volcán.

Comparando los resultados de las simulaciones para cada emisión (vehicular, industrial y volcánica) de forma individual (Figura 3.16b), se observa el bajo aporte de las emisiones volcánicas sobre los niveles de SO<sub>2</sub> en el centro de la ciudad. Este resultado permite plantear una hipótesis inicial del comportamiento de este contaminante en Manizales. Ésta se caracteriza por una mayor influencia de emisiones antropogénicas de compuestos azufrados como el SO<sub>2</sub>, en una zona donde existe actividad industrial moderada (zona del centro histórico – estación GOB) que emite este contaminante (tal como se mostró en el capítulo 2, Figura 2.7), y además existe la influencia de emisiones vehiculares en la zona. La comparación entre estas dos fuentes antropogénicas a los niveles de SO<sub>2</sub> sobre el centro de Manizales, no sugiere un impacto mayoritario entre la emisión vehicular y la industrial. Lo anterior, teniendo en cuenta no solo la similitud de los resultados de los perfiles horarios de SO<sub>2</sub> obtenidos en la estación GOB (Figura 3.16b), sino también resultados similares en los estadísticos de error descritos en la Tabla 3.6. La mayor diferencia fue obtenida en el coeficiente de correlación lineal ( $r$ ), el cual presentó valores más altos para emisión vehicular ( $r = 0.6$ ) en comparación con los obtenidos con la emisión industrial ( $r = 0.2$ ).



(a)

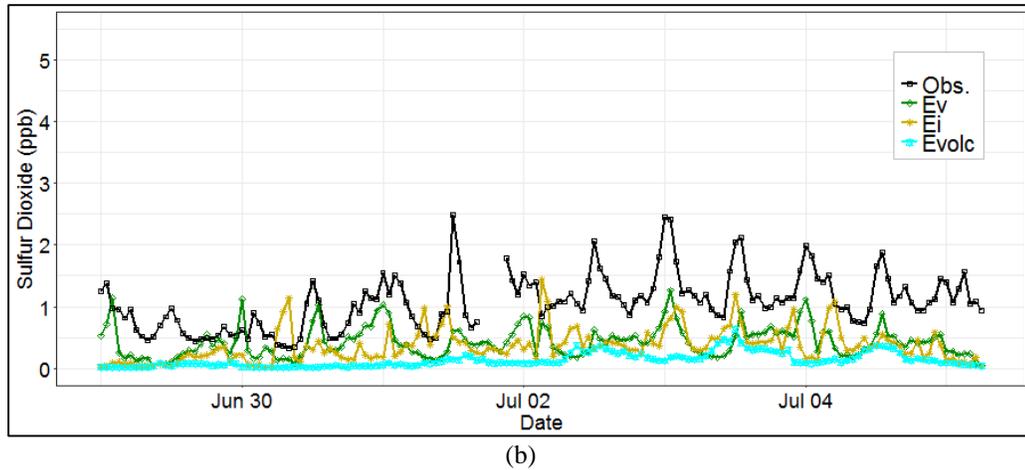


Figura 3.16. Concentración de SO<sub>2</sub> en la estación GOB observada (Obs) y simulada con WRF-Chem en el dominio D4. a) Resultados para simulación del caso base (Evi-Evolc) y simulación incluyendo solo emisiones antropogénicas (Evi). b) Resultados para simulaciones activando cada emisión individual: emisión vehicular (Ev), emisión industrial (Ei) y emisión volcánica (Evolc).

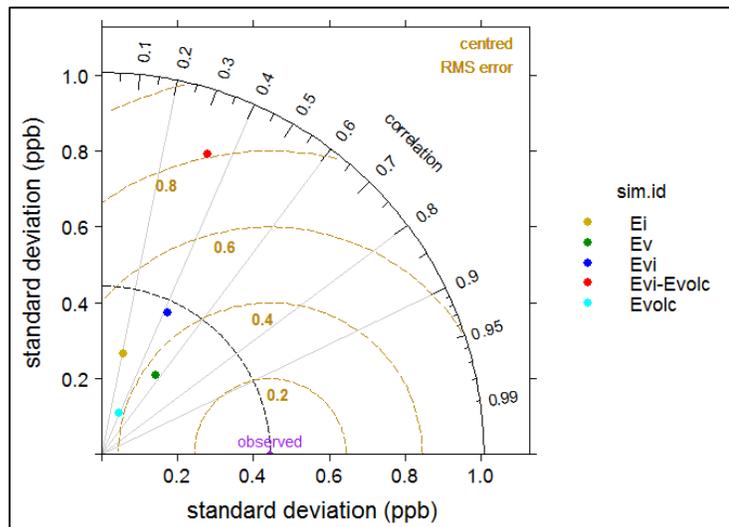


Figura 3.17. Diagrama de Taylor comparando los resultados de simulación de SO<sub>2</sub> en superficie (estación GOB) para los diferentes casos de estudio analizados.

Tabla 3.6. Estadísticos de evaluación para concentración de SO<sub>2</sub> en la estación GOB para los diferentes casos de estudio analizados.

Id. Simulación	Valor de estadístico para concentración de SO <sub>2</sub> en superficie			
	MB	MGE	RMSE	r
Evi-Evolc	0.09	0.58	0.81	0.33
<b>Evi</b>	<b>-0.34</b>	<b>0.47</b>	<b>0.57</b>	<b>0.42</b>
Ev	-0.64	0.65	0.73	0.57
Ei	-0.69	0.74	0.84	0.21
Evolc	-0.93	0.93	1.02	0.39

Es importante destacar que los resultados estadísticos obtenidos en todas las simulaciones realizadas, no evidencian una representación óptima de las observaciones para la concentración de SO<sub>2</sub> en GOB. Las concentraciones observadas son muy variables y no presentan un comportamiento uniforme durante el periodo de análisis, lo que dificulta en gran medida que se tengan altas correlaciones estadísticas con las simulaciones. Sin embargo, los resultados de las simulaciones muestran valores de concentración en un intervalo similar al observado, lo que sugiere que el modelo representa relativamente bien y de forma general la dinámica de este contaminante en el centro de la ciudad.

Con el fin de tener una idea de la representación espacial de los resultados obtenidos en las simulaciones, se compararon los resultados promedio de SO<sub>2</sub> durante el periodo de simulación con los resultados promedio del monitoreo pasivo de SO<sub>2</sub> realizado en 2015 durante los meses de febrero y noviembre (ver detalles de este monitoreo en el Anexo G). Esta comparación, que se realiza de forma indicativa debido a las diferencias temporales entre las observaciones y la simulación, busca generar bases adicionales que permitan identificar si el modelo representa de forma correcta cambios de concentración en otras zonas (urbanas y rurales) influenciadas por emisiones de SO<sub>2</sub>. El objetivo principal de este análisis es generar mayores herramientas para analizar la influencia de las fuentes de emisión sobre los niveles de SO<sub>2</sub> en Manizales y sus áreas aledañas.

En la Tabla 3.7 se muestran los resultados promedio de monitoreo pasivo (PAS) durante 2015 y la concentración promedio obtenida durante el periodo de simulación asociada a la ubicación de cada una de las estaciones de PAS. Un resultado interesante se obtuvo al analizar el punto de mayor influencia de emisiones industriales (P12), que está ubicado en la zona industrial Maltería al oriente de la ciudad. En esta estación, tanto el monitoreo PAS como las simulaciones (caso base, *Evi-Evolc*, y simulación *Evi*) registran los mayores niveles de concentración de SO<sub>2</sub> en la zona urbana (3.41 ppb – PAS; 3.29 ppb – *EviEvolc* y 2.55 ppb – *Evi*), sugiriendo el efecto de las emisiones industriales sobre los niveles de SO<sub>2</sub> al oriente del área urbana de Manizales. La influencia de la emisión industrial es soportada por el mínimo aporte registrado al incluir en el modelo únicamente emisiones vehiculares (simulación *Ev*), obteniendo en el punto P12 una concentración media de solo 0.25 ppb.

De otra parte, el análisis de los puntos ubicados en la zona rural hacia el suroriente de la ciudad (P1, P2 y P3), los cuales están más próximos al volcán Nevado del Ruiz, muestra una clara influencia de las emisiones volcánicas sobre los niveles de SO<sub>2</sub>. En el caso de monitoreo PAS, las estaciones en la zona rural con mayores concentraciones de SO<sub>2</sub> fueron P1 (1.97 ppb) y P3 (3.41 ppb). Al analizar la simulación del caso base (*Evi-Evolc*), que incluye emisiones volcánicas, la mayor concentración asociada a estaciones de la zona rural se obtuvo en P1 (3.54 ppb). En este punto, la simulación con emisiones antropogénicas únicamente (*Evi*) muestra un aporte casi nulo a la concentración media de SO<sub>2</sub> (0.04 ppb). Este resultado sugiere que la dinámica de SO<sub>2</sub> en las zonas rurales hacia el suroriente de la ciudad es controlada por las emisiones volcánicas, siendo mínimo el transporte de emisiones antropogénicas (industria principalmente) hacia esta región.

Un comportamiento particular se registró en la estación P3, en la cual el monitoreo PAS registró una concentración de SO<sub>2</sub> media de 3.41 ppb en 2015, mientras que con la simulación base *Evi-Evolc* se obtuvo una concentración media durante el periodo de simulación de 0.52 ppb. Este valor tan bajo de concentración puede explicarse al analizar la dirección de la dispersión de la pluma de emisión volcánica. El punto de monitoreo P3, está ubicado un poco más hacia el norte del cráter del volcán (Figura 1, Anexo G). Como se mostró en la Figura 3.15, la dirección predominante de la dispersión de la pluma volcánica durante el periodo de simulación (junio 29 a julio 5 de 2015), fue en la dirección noroccidente y occidente del volcán, por lo tanto, durante el periodo de simulación el efecto de las emisiones volcánicas sobre el punto P3 fue muy bajo. De otra parte, analizando las imágenes satelitales del AURA/OMI para los meses de monitoreo pasivo (febrero y noviembre de 2015), fue posible identificar algunos días (por ejemplo los días 8, 10 y 12 de febrero, y 7, 16, 18, 27 y 30 de noviembre) con direcciones de la pluma de emisión hacia el norte del volcán, donde se encuentra la

estación P3, comportamiento que puede explicar las mayores concentraciones obtenidas en el monitoreo PAS en este punto. Las imágenes satelitales mencionadas no se muestran en este estudio, sin embargo, el lector puede consultarlas en el siguiente enlace: <https://so2.gsfc.nasa.gov/>.

**Tabla 3.7. Comparación de concentraciones promedio de SO<sub>2</sub> obtenidas en 2015 por monitoreo pasivo (PAS) y los promedios de concentración registrados en el periodo de simulación de esta investigación. Detalles sobre los resultados del estudio de PAS se muestran en el Anexo G.**

Id. Estación PAS <sup>a</sup>	Altitud msnm	Ubicación	Influencia de tráfico / industria	SO <sub>2</sub> promedio en ppb				
				PAS Obs. <sup>b</sup>	Evi-Evolc	Id. Simulación <sup>c</sup>		
						Evi	Ev	Ei
P5	2219	Urbana – Occidente	Media / Ninguna	1.60	1.16 (0.83)	0.72 (0.41)	0.43 (0.25)	0.37 (0.27)
P7	2258	Urbana – Centro histórico	Media / Baja	1.87	1.16 (0.83)	0.72 (0.41)	0.43 (0.25)	0.37 (0.27)
P6	2161	Urbana – Centro histórico	Alta / Baja	1.75	1.16 (0.83)	0.71 (0.43)	0.41 (0.27)	0.37 (0.29)
P8	2154	Urbana – Centro	Media / Ninguna	1.37	1.64 (1.34)	0.98 (0.53)	0.49 (0.38)	0.54 (0.47)
P4	2087	Urbana – Norte	Alta / Baja	1.98	1.17 (0.83)	0.69 (0.45)	0.42 (0.33)	0.36 (0.30)
P9	1900	Urbana – Sur	Alta / Baja	1.79	1.59 (1.21)	0.91 (0.52)	0.38 (0.24)	0.59 (0.49)
P10	2251	Urbana – Nororient	Baja / Media	1.59	1.89 (1.43)	1.03 (0.69)	0.23 (0.20)	0.89 (0.72)
P11	2091	Urbana – Oriente	Baja / Media	1.58	3.19 (2.69)	2.02 (1.94)	0.21 (0.16)	1.99 (1.97)
P12	2325	Urbana – Oriente	Baja / Alta	3.41	3.29 (2.95)	2.55 (2.85)	0.25 (0.41)	2.51 (2.77)
P2	2350	Rural – Surorient	Ninguna	1.90	2.08 (2.88)	0.09 (0.07)	0.07 (0.06)	0.09 (0.07)
P1	3467	Rural – Surorient	Ninguna	1.97	3.54 (6.31)	0.04 (0.06)	0.03 (0.05)	0.04 (0.06)
P3	3657	Rural – Surorient	Ninguna	3.41	0.52 (0.68)	0.35 (0.70)	0.35 (0.71)	0.34 (0.69)

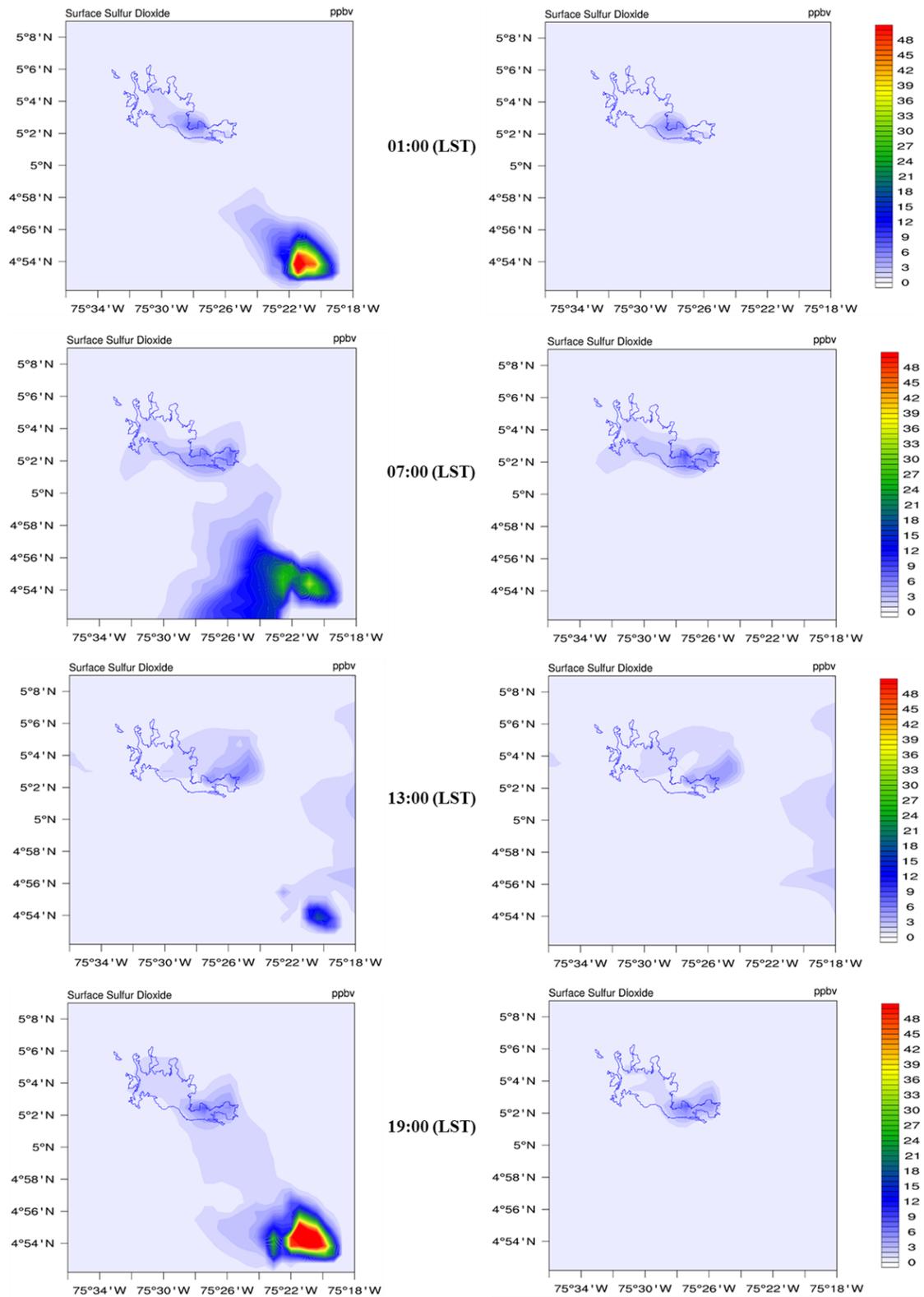
<sup>a</sup> La ubicación de las estaciones de PAS se muestra en la Figura 1 del Anexo G.

<sup>b</sup> Promedios de SO<sub>2</sub> obtenidos a partir dos campañas de monitoreo PAS (30 días cada una) realizadas durante febrero y noviembre de 2015.

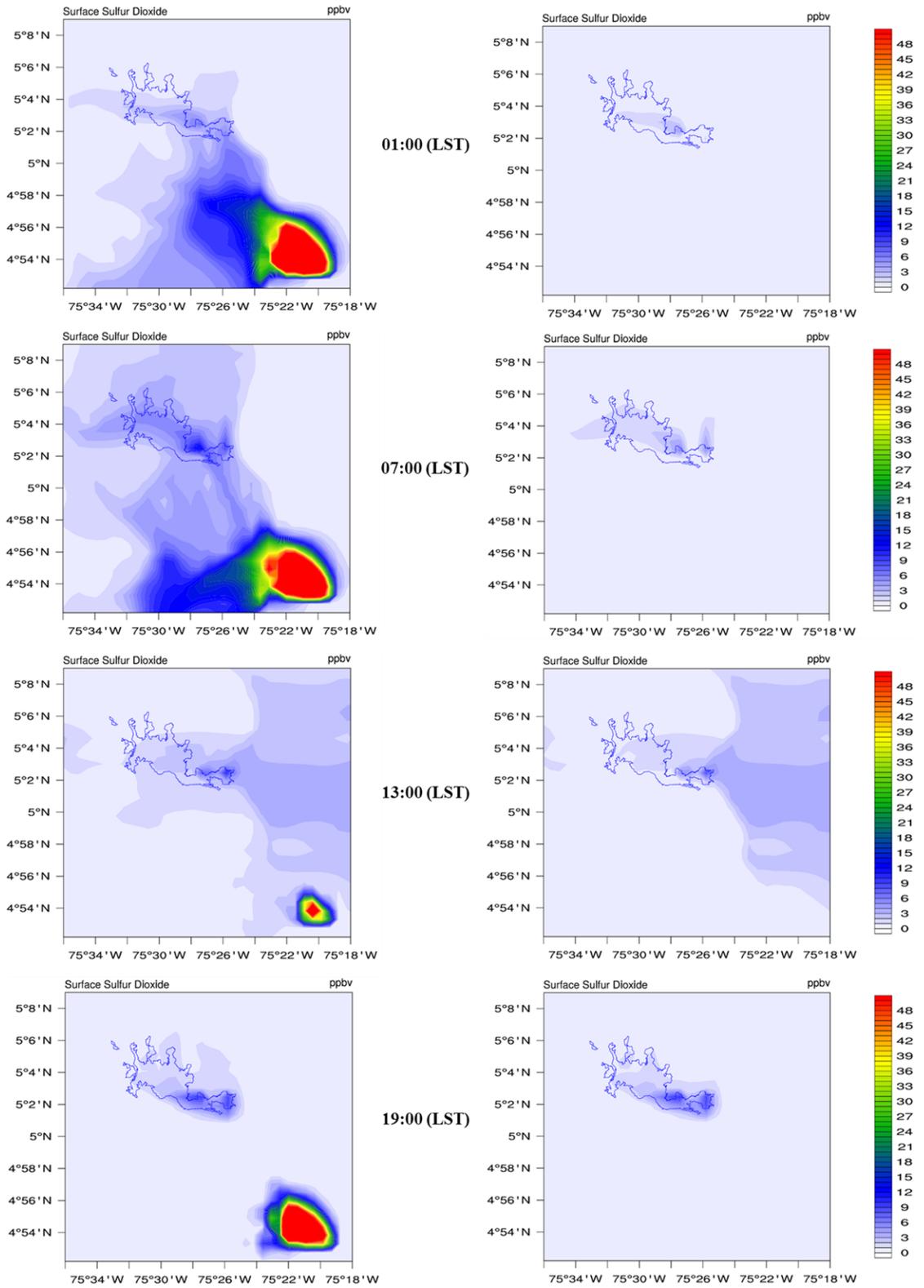
<sup>c</sup> Promedios de SO<sub>2</sub> obtenidos de la simulación con WRF-Chem para los diferentes casos de estudio evaluados (ver Tabla 3.4). La simulación se realizó para una semana durante periodo seco.

### **Dispersión de SO<sub>2</sub> en superficie para casos con emisión volcánica (Evi-Evolc) y sin esta (Evi)**

Se realizaron mapas de concentración en superficie de SO<sub>2</sub> para diferentes horas del día realizando un zoom sobre la zona de estudio que cubre el área urbana de Manizales y la zona del volcán Nevado del Ruiz (a partir de los resultados con WRF-Chem en el dominio D4). Lo anterior con el fin de profundizar un poco más en el entendimiento de la dinámica de dispersión del SO<sub>2</sub> sobre Manizales durante el periodo de estudio, y comprender las diferencias obtenidas entre el caso base (Evi-Evolc) y la simulación con emisiones antropogénicas únicamente (Evi).



**Figura 3.18. Concentración de SO<sub>2</sub> en superficie para diferentes horas (hora local, LST) del día 30 de Junio de 2015, obtenidos con WRF-Chem para la simulación Evi-Evolc (izquierda) y la simulación Evi (derecha).**



**Figura 3.19.** Concentración de SO<sub>2</sub> en superficie para diferentes horas (hora local, LST) del día 3 de Julio de 2015, obtenidos con WRF-Chem para la simulación Evi-Evolc (izquierda) y la simulación Evi (derecha).

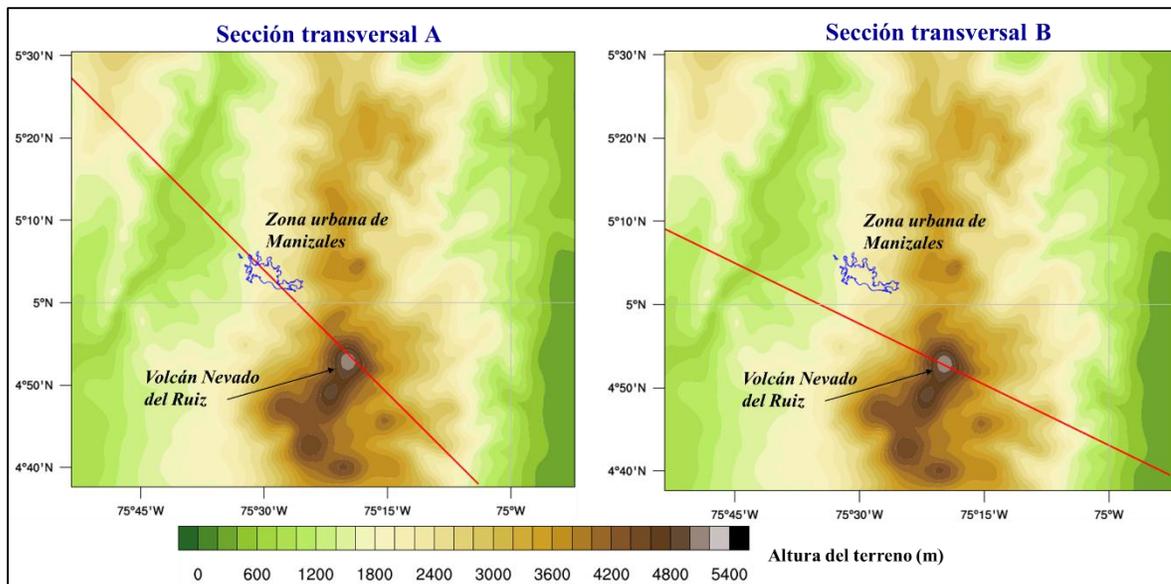
Este análisis fue realizado para dos días del periodo de simulación: junio 30 (Figura 3.18) y julio 3 (Figura 3.19), los cuales presentaron un comportamiento distinto según los resultados obtenidos en la estación GOB, donde se tienen datos observados de SO<sub>2</sub> horarios. Como se muestra en la Figura 3.16a, durante junio 30 las concentraciones simuladas con ambos casos estuvieron cercanas a las observaciones. Caso contrario ocurrió en julio 3, donde se presentaron diferentes picos de concentración en la simulación *Evi-Evolc* que sobreestimaban las concentraciones observadas. El análisis comparativo de los mapas de dispersión de SO<sub>2</sub> permite sugerir lo siguiente:

- Las concentraciones de SO<sub>2</sub> en superficie producto de emisión del volcán tienen valores de máxima concentración en las zonas cercanas al punto de emisión volcánica. Asimismo, no siempre esta emisión logró generar aumentos de concentración de SO<sub>2</sub> sobre el área urbana de Manizales. Cuando este fenómeno se da, la dispersión de SO<sub>2</sub> volcánico ingresa inicialmente por la zona oriental de la ciudad. Sin embargo, se observa como los niveles de concentración de SO<sub>2</sub> son muy similares, y en ocasiones inferiores, a las concentraciones generadas por fuentes antropogénicas, como por ejemplo las emisiones estacionarias puntuales en la zona industrial al oriente de la ciudad.
- Durante el día 3 de julio, se observa el efecto del aumento de la concentración de SO<sub>2</sub> en el área urbana de Manizales por la llegada de la pluma de emisión volcánica a las 01:00 y 07:00 horas (LST), fenómeno que incrementa los niveles de este contaminante en toda la ciudad. Esta dispersión explica los picos de concentración obtenidos en la estación GOB. Como se sugirió en el análisis temporal de la Figura 3.16a, una posible subestimación de la altura de la pluma de emisión volcánica puede ser la causa de esta sobreestimación.
- Esta primera aproximación a la dinámica de SO<sub>2</sub> en Manizales, sugiere que la dispersión de emisiones antropogénicas en la ciudad es de características locales. Las bajas velocidades del viento influyen en la formación de zonas de mayores concentraciones cerca de los puntos críticos de emisión. En el caso del SO<sub>2</sub>, por ejemplo, la zona de mayor concentración de SO<sub>2</sub> se presenta al oriente de la ciudad, asociada a las emisiones de este contaminante producto de la actividad industrial que predomina sobre esta zona.

### ***Dispersión de SO<sub>2</sub> en diferentes niveles verticales a partir de resultados del caso base (Evi-Evolc)***

En esta sección se buscó realizar un análisis de la variación de la concentración de SO<sub>2</sub> en diferentes niveles verticales para la simulación base, e intentar dar respuesta a las razones de la baja influencia de las emisiones volcánicas sobre los niveles de SO<sub>2</sub> en Manizales durante el periodo de estudio. Lo anterior, teniendo en cuenta las bajas concentraciones de SO<sub>2</sub> que se alcanzan en el área urbana, a pesar de los altos flujos de emisión volcánica horaria que pueden llegar a registrarse (por ejemplo, durante el periodo de simulación se incluyeron flujos de más de 200 ton/h de SO<sub>2</sub> como se muestra en la Figura 3.5).

Se realizaron dos cortes transversales sobre el dominio de simulación D4 (Figura 3.20) para graficar la variación de la concentración de SO<sub>2</sub> en función de la altura durante diferentes horas del día. El primer corte transversal, denominado sección transversal A, realiza un corte longitudinal sobre la ciudad de Manizales pasando por la estación GOB y sobre el punto de emisión del volcán Nevado del Ruiz. El segundo corte transversal, denominado sección transversal B, fue ubicado siguiendo la dirección predominante de la pluma de emisión volcánica. Este análisis fue realizado para los dos días seleccionados en la sección anterior: junio 30 (Figura 3.22 y Figura 3.23) y julio 3 (Figura 3.24 y Figura 3.25).



**Figura 3.20. Secciones transversales (línea roja) seleccionadas para graficar la variación de concentración de SO<sub>2</sub> con la altura para diferentes horas de simulación de los días 30 de junio y 3 de julio de 2015.**

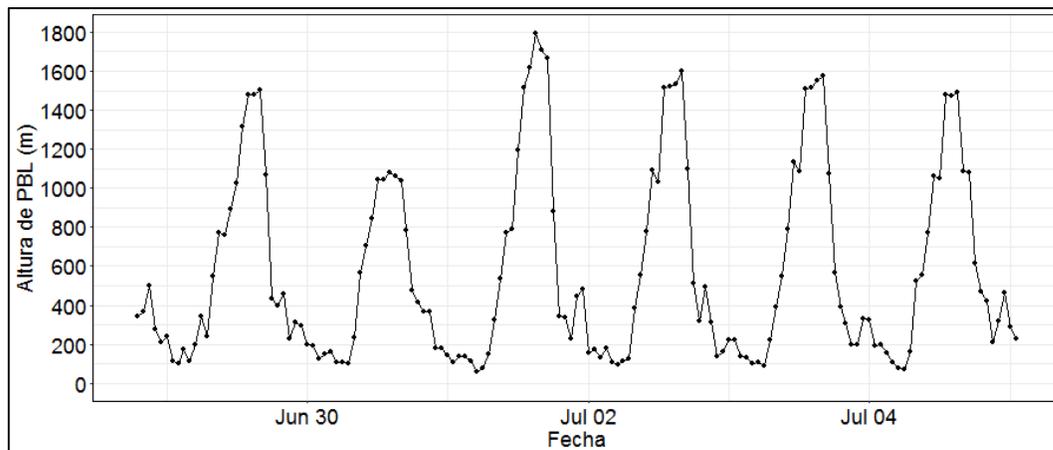
Los resultados para ambos días muestran resultados similares. Analizando el corte transversal A, es posible notar que la pluma de emisión de SO<sub>2</sub> no logra influenciar en gran medida zonas con alturas inferiores a los 3000 m, como es el caso de Manizales cuya altura media es de 2150 msnm, sin embargo, en este tipo de corte no es posible diferenciar el comportamiento o la dispersión de la pluma de emisión volcánica.

De otra parte, los resultados obtenidos a partir del corte transversal B, muestran como la emisión volcánica se dispersa principalmente por encima de los 3000 m de altura. Al analizar la altura de la capa de mezcla (PBL) obtenida con el modelo WRF-Chem en el punto asociado a la estación GOB (Figura 3.21), se observa que las mayores alturas de capa límite se obtienen durante algunas horas del mediodía con alturas entre los 1500 m y 1800 m, mientras que durante el resto del día la altura de la PBL no sobrepasa los 1200 m. De forma general, la altura media de PBL en Manizales durante las horas del día con influencia de radiación solar incidente, se estimó en 914 m ( $\pm 506$  m). En horas de la noche, la altura media de la PBL (capa estable) se estimó en 264 m ( $\pm 153$  m). Estos resultados sugieren que durante el periodo de simulación las emisiones de gases del volcán Nevado del Ruiz, tienden a pasar por encima de la PBL en Manizales, ejerciendo una baja influencia en el aumento de los niveles de SO<sub>2</sub> en superficie sobre la ciudad.

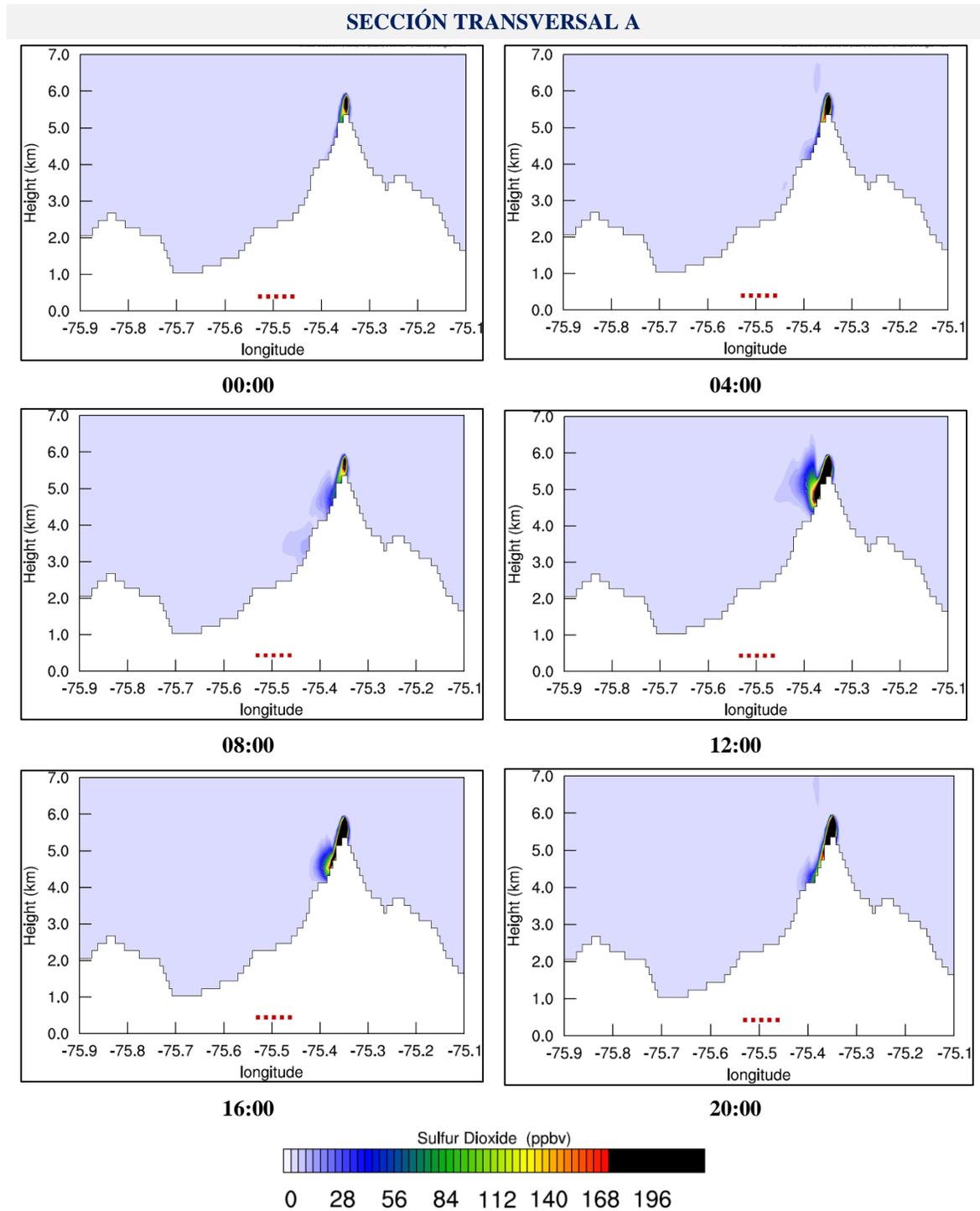
Este fenómeno podría explicar la causa de las bajas concentraciones de SO<sub>2</sub> observadas en la estación GOB, las cuales no superaron los 1.6  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  horario en promedio durante el año 2015 (ver Figura 3.12). Además, este análisis es un primer indicio del impacto que ejercen las emisiones antropogénicas sobre los niveles de SO<sub>2</sub> en Manizales, principalmente las fuentes estacionarias puntuales sobre la zona oriental de la ciudad. Lo anterior, teniendo en cuenta que estas fuentes dominan las emisiones antropogénicas de SO<sub>x</sub> en Manizales, con un 81% de aporte al comparar las fuentes móviles en ruta y estacionarias puntuales. Sumado a esto, la zona oriental de Manizales es caracterizada por ser la zona con mayor densidad industrial de la ciudad y donde se obtuvieron los mayores flujos de emisión de SO<sub>2</sub> a partir de la desagregación espaciotemporal del inventario de emisiones.

Otro de los fenómenos de contaminación de importancia en Manizales, es el fenómeno de lluvia ácida. Éste fue identificado previamente en la ciudad y ha sido ampliamente descrito en investigaciones previas (Vélez et al., 2010; González y Aristizábal, 2012). Dichos estudios lograron cuantificar los niveles de acidez de la lluvia en Manizales, identificando además un comportamiento uniforme de la acidez para diferentes sectores del área urbana. Sin embargo, no se conoce claramente cual es la principal fuente causante del fenómeno en la región. El fenómeno de lluvia ácida puede generarse por la interacción de sus precursores ( $\text{SO}_x$  y  $\text{NO}_x$ ) en reacciones de oxidación y reacciones en fase líquida, las cuales presentan una mayor afinidad por el  $\text{SO}_2$  gracias a su solubilidad. Los procesos de de formación del fenómeno pueden darse tanto al interior de la nube (in-cloud) o por debajo de esta (below-cloud) gracias a fenómenos como la remoción por vía húmeda o scavenging (González, 2012).

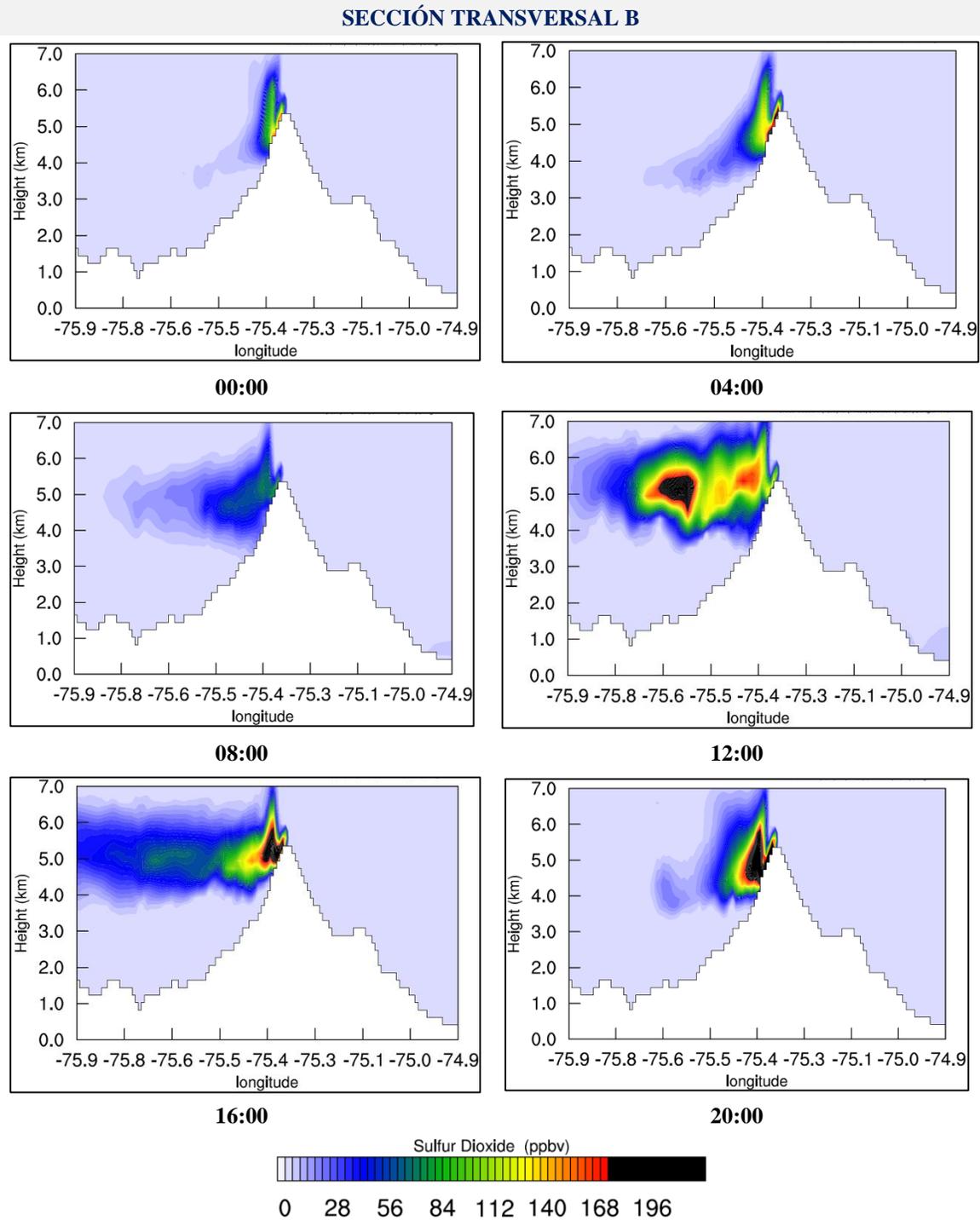
Los resultados obtenidos en las simulaciones con WRF-Chem para el caso base, podrían sugerir que las emisiones volcánicas si tienen una influencia sobre la formación del fenómeno de lluvia ácida en la ciudad. Lo anterior teniendo en cuenta que las mayores concentraciones de  $\text{SO}_2$  producto de la emisión volcánica fueron observadas en niveles verticales superiores (entre 3000 m y 6000 m de altura). En este sentido, se podría sugerir que dichas emisiones tienen un papel importante en los procesos de reacción y remoción dentro de las nubes, que convergen finalmente en la formación del fenómeno por vía húmeda en regiones cercanas, como es el caso de Manizales. Este fenómeno podría estudiarse en profundidad a futuro a partir de simulaciones con el modelo WRF-Chem, ya que este permite la activación de mecanismos de reacción dentro de las nubes para el estudio de la química atmosférica y los procesos de remoción por vía húmeda.



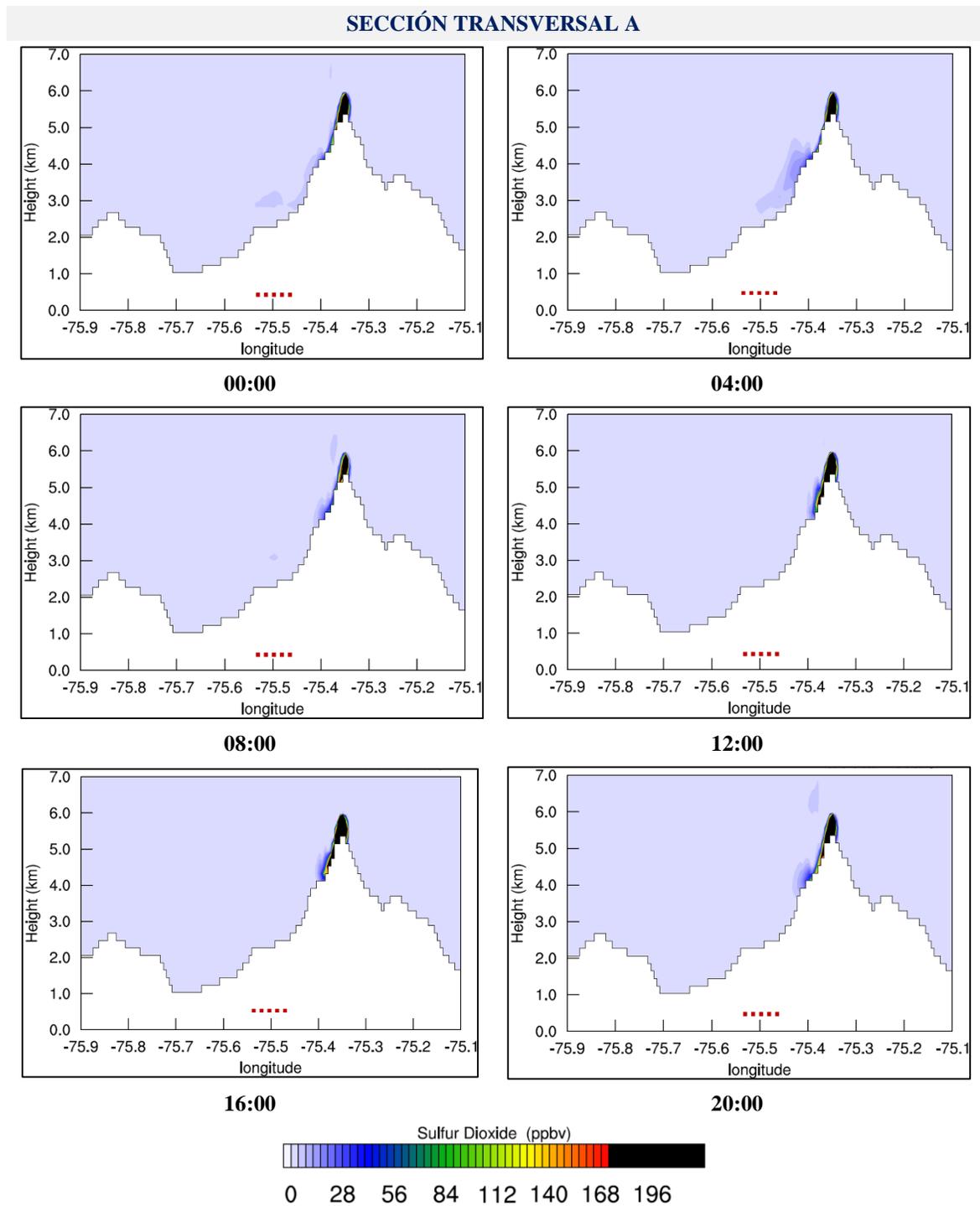
**Figura 3.21.** Altura de PBL obtenida en la estación GOB durante la simulación con WRF-Chem (Eje de fecha en hora local, LST).



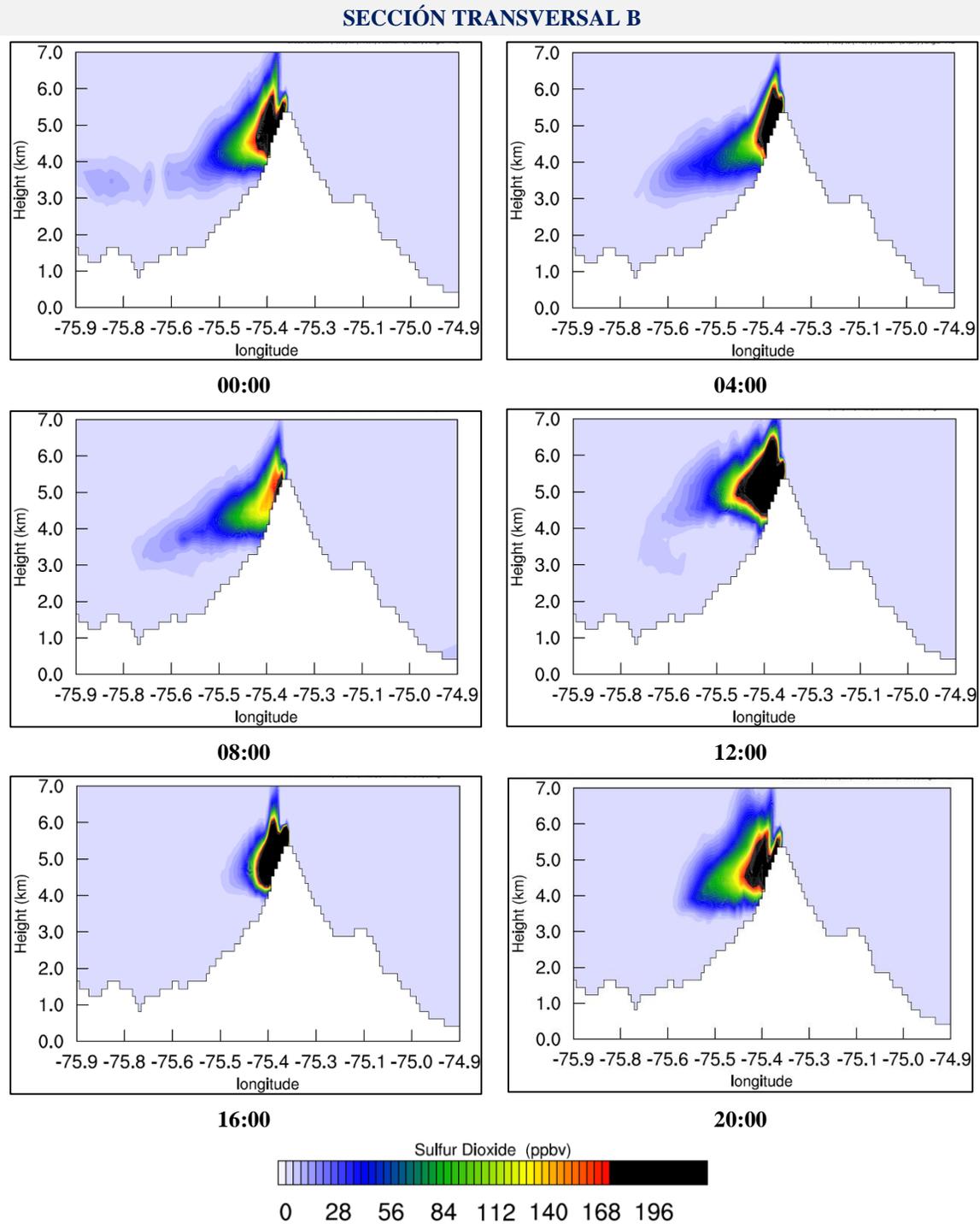
**Figura 3.22.** Variación de la concentración de SO<sub>2</sub> para diferentes niveles verticales en la sección transversal A. Resultados para el 30 de junio de 2015 en diferentes horas del día (LST). La línea punteada roja indica la zona de longitud geográfica donde se ubica Manizales.



**Figura 3.23.** Variación de la concentración de SO<sub>2</sub> para diferentes niveles verticales en la sección transversal B. Resultados para el 30 de junio de 2015 en diferentes horas del día (LST).



**Figura 3.24.** Variación de la concentración de SO<sub>2</sub> para diferentes niveles verticales en la sección transversal A. Resultados para el 3 de julio de 2015 en diferentes horas del día (LST). La línea punteada roja indica la zona de longitud geográfica donde se ubica Manizales.



**Figura 3.25.** Variación de la concentración de SO<sub>2</sub> para diferentes niveles verticales en la sección transversal B. Resultados para el 3 de julio de 2015 en diferentes horas del día (LST).

#### **3.4.4. DISCUSIÓN SOBRE POSIBLES FUENTES DE INCERTIDUMBRE EN LOS EJERCICIOS DE SIMULACIÓN REALIZADOS**

Los procedimientos de simulación de la contaminación del aire, involucran un gran número de variables de entrada y variables propias de los esquemas de configuración del modelo, razón por la cual las fuentes de incertidumbre son diversas. En esta sección, se pretende realizar un análisis crítico y sucinto de las fuentes de incertidumbre de mayor importancia en la aplicación del modelo WRF-Chem para Manizales.

En lo que respecta a los datos estáticos de entrada en el modelo, una fuente de incertidumbre importante tiene que ver con las características de la información topográfica y los mapas de usos y cobertura del suelo. Las fuentes de información empleadas para generar estos campos estáticos, topografía de USGC con resolución aproximada de 1 km en D4 y usos de suelo proveniente de MODIS con 20 categorías, podrían no representar de forma estricta la región de estudio. Como se discutió anteriormente, perfiles no resueltos de topografía y una representación errónea de los usos, cobertura y rugosidad del suelo, pueden ser la causa de las diferencias obtenidas en la representación de parámetros meteorológicos como el caso de los vientos en superficie. Se recomienda entonces que futuros ejercicios de simulación en la región, evalúen si mejoras en la información estática de entrada pueden garantizar mejores resultados en la representación de la meteorología de la zona.

En términos de los datos dinámicos de entrada al modelo, se destacan como dos posibles fuentes de incertidumbre los datos de entrada meteorológicos provenientes de modelos globales y la información de entrada de emisiones de contaminantes del aire. En cuanto a la información meteorológica de entrada, tanto la baja resolución de los modelos globales como el tipo de modelo empleado (por ejemplo 0.5° del modelo GFS para la simulación en este trabajo), son factores que incorporan una incertidumbre a las simulaciones. En este sentido, trabajos futuros en donde se evalúe la influencia de otros tipos de modelos (por ejemplo datos del ECMWF - European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) podrían ser interesantes en la evaluación de la influencia de esta información en los resultados finales. Asimismo, la disponibilidad de información de modelos globales con una mayor resolución ha venido en aumento, lo cual podría permitir no solo tener información más detallada, sino también permitiría una reducción en los tiempos de simulación al reducir el número de dominios necesarios para la realización del downscaling meteorológico.

La otra fuente de datos de entrada que, como se demostró en este trabajo es de suma importancia, son los flujos de emisión incorporados al modelo. Como se discutió en el Capítulo 2, en el caso de las emisiones por fuentes antropogénicas es necesario no solo que se realicen procedimientos de actualización del inventario, sino también que se incluyan otras fuentes de emisión de importancia como lo son las fuentes por resuspensión y fuentes estacionarias de área. Sumado a esto, la recomendación de refinar aún más la técnica de desagregación espaciotemporal de las emisiones, y por qué no, evaluar el uso de información proveniente de modelos de tráfico que permitan obtener información detallada de tipo bottom-up de flujos vehiculares en la ciudad. En el caso de las emisiones naturales provenientes del volcán Nevado del Ruiz, una primera aproximación hacia la reducción de incertidumbres en los resultados obtenidos, es la evaluación de una altura de emisión dinámica y no una altura promedio como se realizó en este estudio. En este sentido existen retos no solo en la obtención de la información de las alturas de la pluma de emisión volcánica, sino también en el desarrollo de un código que permita incluir las emisiones horarias y su altura de pluma específica en el modelo. En este tema, también resultaría interesante utilizar WRF-Chem para estudiar el efecto que tienen las emisiones por erupción de ceniza volcánica sobre Manizales.

En el tema del periodo de simulación evaluado también se pueden presentar incertidumbres. Es importante que trabajos futuros exploren como el modelo representa el comportamiento de la

meteorología y la contaminación del aire en Manizales a partir de periodos de simulación más extensos, por ejemplo de varios meses.

Otra fuente de incertidumbre está relacionada con la selección de los esquemas y configuración óptima del modelo para representar la meteorología y la química de la atmósfera. En este trabajo se propone una configuración del modelo con base en un análisis de sensibilidad de esquemas físicos propuestos en otros estudios en Colombia y Suramérica (ver sección 3.4.2). Sin embargo, es importante que futuros estudios evalúen no solo otras posibles configuraciones de mecanismos físicos, sino también que se comience a realizar un análisis de sensibilidad evaluando la influencia de otros mecanismos químicos en la representación de los contaminantes del aire en la región.

# CAPÍTULO 4

## CONCLUSIONES, RECOMENDACIONES Y TRABAJO FUTURO

---

Este trabajo describe la primera aplicación de un modelo de transporte químico en una ciudad intermedia andina de Colombia, para el estudio de la contaminación del aire y el análisis del impacto relativo de sus principales fuentes de emisión. Para llevar a cabo este objetivo, fue necesario inicialmente estimar los flujos de emisión antropogénica que predominan en la ciudad (fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales), y recopilar información de emisiones volcánicas para su posterior uso en los ejercicios de simulación. La información local de emisiones fue utilizada como información de entrada en el modelo de transporte químico, procurando una representación realista de la dinámica de contaminación del aire en la ciudad, asociada los niveles de contaminantes de importancia como el ozono troposférico, material particulado (PM<sub>10</sub>) y dióxido de azufre. Los resultados obtenidos fueron contrastados con observaciones de contaminantes del aire que son medidos en diferentes puntos de la ciudad mediante la operación de la RVCA.

En este sentido, la investigación realizada abordó de forma completa tres aspectos fundamentales para la conformación de un Plan de Gestión de Calidad del Aire: inventarios de emisión, monitoreo de contaminantes del aire, y modelización numérica. Este estudio provee entonces bases sólidas para la implementación de políticas públicas en la gestión de la calidad del aire en la ciudad de Manizales, y puede servir como base para su implementación en otras ciudades intermedias de Colombia y Latinoamérica.

De forma específica, los resultados de este trabajo permiten concluir lo siguiente:

- La contribución a las emisiones por fuentes antropogénicas (móviles en ruta y estacionarias puntuales) en Manizales es dominada por la actividad vehicular, con más del 90% de las emisiones para la mayoría de contaminantes evaluados, a excepción de los SO<sub>x</sub>, cuya contribución predominante se atribuye a fuentes estacionarias puntuales (81% de la emisión total de SO<sub>x</sub>). Las emisiones CO (43.4 Gg/año) y NMVOC (9.6 Gg/año) estuvieron asociadas principalmente al uso de motocicletas (50% y 81% del total de emisiones respectivamente), mientras que los buses de transporte público fueron las principales fuentes de PM<sub>10</sub> (47% - 0.36 Gg/año) y NO<sub>x</sub> (48% - 2.4 Gg/año). Este es un resultado que debe tenerse en cuenta por las entidades de control y los tomadores de decisiones, debido al constante incremento del parque automotor de la ciudad, especialmente las motos y vehículos particulares, que han aumentado un 150% y 77% respectivamente entre 2009 y 2016.
- La distribución de las emisiones vehiculares sobre el área urbana de Manizales aplicando una técnica top-down, permitió obtener un inventario desagregado en tiempo (1 h) y espacio (1km x 1km) en alta resolución. La desagregación realizada permitió analizar puntos críticos de emisión, además, permitió el uso posterior del inventario en ejercicios de modelización de calidad del aire. Los puntos críticos de emisión obtenidos estuvieron localizados en el

centro histórico de la ciudad y la zona residencial-comercial. Comparando ambas zonas, las emisiones normalizadas por  $\text{km}^2$  fueron superiores en el centro histórico con valores porcentuales de 6% (CO) y 5% ( $\text{PM}_{10}$ ) de la emisión total por  $\text{km}^2$ , en comparación con los índices obtenidos en la zona residencial-comercial con valores de 2% de emisión por  $\text{km}^2$  para CO y  $\text{PM}_{10}$ . Este resultado evidenció la importancia de la zona centro de la ciudad, como punto sensible de contaminación atmosférica en un área influenciada por tránsito de vehículos particulares, motocicletas y buses de transporte público principalmente.

- En el análisis de las emisiones por fuentes estacionarias puntuales, se destaca el aporte de la industria de alimentos y bebidas como la principal fuente de los contaminantes  $\text{PM}_{10}$  (63%),  $\text{SO}_x$  (55%) y  $\text{NO}_x$  (45%) del sector industrial; mientras que procesos de fundición de metales contribuyeron con las mayores emisiones de CO (73%) y NMVOC (47%). Como se mencionó anteriormente, las fuentes estacionarias puntuales contribuyen principalmente a la emisión de  $\text{SO}_x$  en la ciudad, con un 81% de aporte sobre el total del inventario. Dicha emisión tiene las zonas de mayor contribución hacia el oriente de la ciudad, donde se concentra el mayor número de fuentes industriales de Manizales.
- En lo que concierne a la aplicación de un modelo de transporte químico en ciudades intermedias como Manizales, es importante resaltar la importancia de la estimación de flujos de emisión locales, que permitan la obtención de resultados representativos y realistas sobre la dinámica de contaminación del aire y el impacto de las fuentes contaminantes. Este hecho se evidenció al comparar los inventarios de emisión globales y el inventario local mediante la aplicación del modelo WRF-Chem en Manizales, para el estudio de contaminantes como  $\text{PM}_{10}$  y  $\text{O}_3$ . Se obtuvieron mejoras significativas en el uso del inventario local en los ejercicios de simulación numérica, mejoras que estuvieron representadas en los estadísticos de desempeño para el  $\text{O}_3$  (MGE = 7.6 ppb, RMSE = 8.8 ppb y  $r = 0.81$ ), en comparación con los estadísticos obtenidos al evaluar inventarios globales (MGE = 11.6 ppb, RMSE = 13.9 ppb y  $r = 0.64$ ). Un resultado similar se obtuvo para concentraciones de  $\text{PM}_{10}$  con valores de  $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (MGE) y  $11.5 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (RMSE) mediante el uso del inventario local, en comparación con los valores obtenidos usando datos de emisión global (MGE =  $28 \mu\text{g}/\text{m}^3$  y RMSE =  $28.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ).
- El análisis del impacto relativo de las fuentes de emisión mediante la simulación numérica, sugiere que la química de formación de  $\text{O}_3$  y los niveles de  $\text{PM}_{10}$  en el aire ambiente de Manizales, son controlados por las emisiones provenientes de fuentes móviles en ruta. En el caso de la dinámica de  $\text{SO}_2$  sobre la ciudad, las concentraciones de este contaminante sobre el área urbana podrían estar influenciadas principalmente por las emisiones antropogénicas, predominantemente del sector industrial localizado al oriente de la ciudad. Los resultados de las simulaciones mostraron como, a pesar de que la magnitud de la emisión volcánica de  $\text{SO}_2$  es superior que las emisiones antropogénicas de  $\text{SO}_2$ , la dispersión de la pluma de emisión volcánica se dió principalmente por encima de los 3000 m de altura, pasando por encima de la PBL en Manizales y ejerciendo una baja influencia en el aumento de los niveles de  $\text{SO}_2$  en superficie sobre la ciudad durante el periodo de simulación.
- Finalmente, el estudio de la dispersión de contaminantes del aire a partir de la simulación numérica, evidenció como la dispersión de contaminantes en Manizales está influenciada por fenómenos de tipo local, en los cuales las zonas de mayores concentraciones en aire ambiente están influenciadas por zonas de alta emisión de contaminantes. La baja dispersión de los contaminantes en la ciudad se asocia a las bajas velocidades del viento que se registran sobre el área urbana, con velocidades predominantes de hasta 2 m/s en el centro y occidente de la ciudad, y velocidades un poco más altas (alrededor de 4 m/s) al oriente del área urbana. Es importante destacar que, a pesar de que el modelo sobreestimó las velocidades del viento

en la zona centro y occidente de Manizales, los valores máximos simulados por el modelo se caracterizaron por vientos de velocidades bajas ( $< 4\text{m/s}$ ), factor que evidenció la predominancia de fenómenos de contaminación locales y que entrega un primer indicio de la dinámica de dispersión de los contaminantes evaluados.

- La influencia de los flujos de emisión locales sobre los resultados obtenidos en las simulaciones, demuestra la importancia de estimar inventarios periódicamente y refinar aún más las técnicas de estimación y las metodologías de desagregación. Lo anterior, con el fin de generar resultados cada vez más precisos y así obtener una comprensión completa de la dinámica de contaminación del aire en Manizales. Este hecho permitirá finalmente evaluar escenarios de emisión como soporte en la implementación de políticas públicas, y generar sistemas de pronóstico de calidad del aire en la ciudad.

### ***Recomendaciones y trabajo futuro***

Este estudio provee información valiosa en el entendimiento de procesos de emisión, transporte y transformación de contaminantes del aire en ecosistemas de montaña. Sin embargo, al ser el primer ejercicio de simulación de calidad del aire con un modelo de transporte químico sobre la ciudad, son varias las recomendaciones que se pueden plantear y que permitirán abrir paso a líneas de trabajo futuro. De forma específica, se podrían recomendar los siguientes puntos que son de importancia para dar continuidad al trabajo desarrollado en esta investigación:

- Realizar procedimientos de actualización del inventario de emisiones locales. Estos procedimientos deberían incluir no solo una actualización detallada de las fuentes de emisión consideradas en este trabajo (fuentes móviles en ruta y fuentes estacionarias puntuales), sino también otras fuentes de emisión de importancia. En términos de fuentes móviles, se recomienda incluir en futuros inventarios las emisiones por resuspensión en vías, principalmente aquellas asociadas a polvo resuspendido y desgaste de frenos y llantas. Diversos estudios destacan la importancia de estas fuentes en las emisiones de contaminantes como  $\text{PM}_{2.5}$  y  $\text{PM}_{10}$ . En el caso de emisiones por fuentes estacionarias, otras fuentes que podrían ser de importancia son las fuentes de área, tales como las estaciones de servicio y centros de almacenamiento de combustible, así como el relleno sanitario. Estas son fuentes que podrían contribuir a emisiones de NMVOC y  $\text{CH}_4$  (en el caso del relleno), gases de importancia en la química de formación de  $\text{O}_3$ .
- Con el fin de refinar la desagregación espacial del inventario de emisiones vehiculares, se recomienda obtener información más detallada de perfiles de flujo vehicular hacia la zona oriental y nororiental de la ciudad. Este parámetro, sumado al efecto de la inclusión de otras fuentes emisión como aquellas por material resuspendido, podría disminuir incertidumbres en la estimación de las emisiones y refinar la desagregación espacial del inventario. Principalmente, en las zonas donde se obtuvo una subestimación importante de concentración por  $\text{PM}_{10}$  a partir del modelo de calidad del aire (oriente y nororiente de la ciudad).
- La aplicación de modelos de transporte químico en ciudades intermedias ubicadas en zonas de topografía compleja, como es el caso de Manizales, trae consigo desafíos adicionales y dificultades en la aplicación de este tipo de modelos. Por lo tanto, es importante continuar con la búsqueda de una configuración óptima de las simulaciones, que permita obtener valores óptimos tanto en la representación de la meteorología (para los vientos principalmente) como en la representación de los contaminantes del aire. Un primer paso puede consistir en la evaluación de los resultados del modelo WRF-Chem al realizar mejoras en los datos estáticos de entrada, utilizando información detallada de topografía y usos del

suelo locales. En este punto es importante generar rutinas que permitan no solo la incorporación de datos de topografía de mayor resolución (topografía IGAC o imágenes satelitales por ejemplo), así como rutinas para incluir información de mapas con datos de cobertura y uso de suelo local.

- Esta investigación es un punto de partida para que se realicen simulaciones en periodos más prolongados, que permitan analizar con un mayor nivel de detalle la capacidad del modelo en la representación de la meteorología y la química de la región de estudio, generando una comprensión profunda de esta dinámica. Se recomienda entonces analizar otros periodos con cobertura mensual o anual, inicialmente en tiempo seco. Sumado a esto, es importante comenzar a realizar simulaciones para periodos con presencia de lluvia, para evaluar la respuesta del modelo en la representación de este parámetro y su influencia sobre la representación de los niveles de contaminantes del aire en la ciudad. Lo anterior teniendo en cuenta las características climáticas de la ciudad, donde la lluvia es un factor recurrente y puede tener un impacto importante en la disminución de los niveles de contaminación del aire.
- Se recomienda explorar en futuras investigaciones otros mecanismos de reacción en el modelo, con el fin de identificar si es posible obtener resultados con menores estadísticos de error para los contaminantes analizados. De igual forma, es importante que en próximos trabajos se estudien otros contaminantes de importancia como lo son los gases CO y NO<sub>x</sub>, además de aerosoles como PM<sub>2.5</sub>.
- En el estudio del impacto de las emisiones provenientes del volcán Nevado del Ruiz sobre Manizales, se recomienda en lo posible la evaluación de una altura de emisión dinámica y no promedio, que permita una representación más realista de la emisión volcánica y su efecto sobre Manizales. Así mismo, utilizar información de monitoreos del fenómeno de lluvia ácida en la ciudad y analizarlos conjuntamente con simulaciones de la emisión de gases del volcán. En este tema, también resultaría interesante utilizar el modelo WRF-Chem para estudiar el efecto que tienen las emisiones por erupción de ceniza volcánica sobre Manizales y regiones aledañas.
- Una de las recomendaciones principales para llevar a cabo estudios de calidad del aire mediante el uso de modelos de transporte químico, tiene que ver con la importancia de aunar esfuerzos entre los distintos grupos de investigación y los entes gubernamentales. Esto permite realizar estudios completos de contaminación del aire en las ciudades y además puede garantizar la implementación de sistemas de modelización robustos, que permitan generar bases sólidas en el entendimiento de las dinámicas de contaminación locales y la generación de políticas de prevención y mitigación.

# ANEXOS

## ANEXO A

### SUPPLEMENTARY MATERIAL

#### RELATIVE IMPACT OF ON-ROAD VEHICULAR AND POINT-SOURCE INDUSTRIAL EMISSIONS OF AIR POLLUTANTS IN A MEDIUM-SIZED ANDEAN CITY

##### Content

##### **Figures**

Figure A.1. Monitoring driving circuits during IVE field campaigns in Manizales.

Figure A.2. Power Bin histograms for each vehicle category analyzed in Manizales during IVE driving pattern campaigns. Values for passenger cars (PC) and motorcycles (2w) are shown for three different route types: primary street (P), secondary street (S) and tertiary street (T).

Figure A.3. Spatial distribution of traffic count points in Manizales for dynamic fleet composition analysis.

Figure A.4. Dynamic composition of vehicular fleet by hour for a typical working day in Manizales.

Figure A.5. Fraction of vehicle starts and soak times in Manizales.

Figure A.6. Distance travelled by passenger cars during the first twenty years of age.

##### **Tables**

Table A.1. Summary of on-road vehicular study in Manizales.

Table A.2. Vehicle technology distribution obtained in Manizales related with IVE vehicular technology categories.

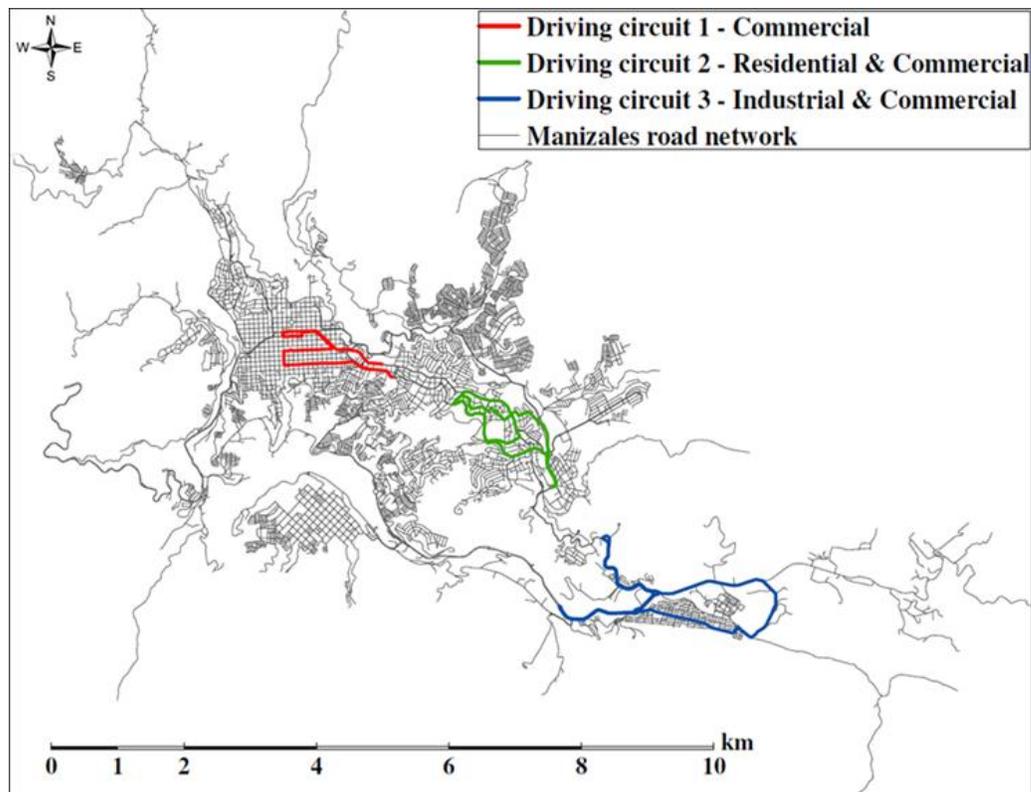


Figure A.1. Monitoring driving circuits during IVE field campaigns in Manizales.

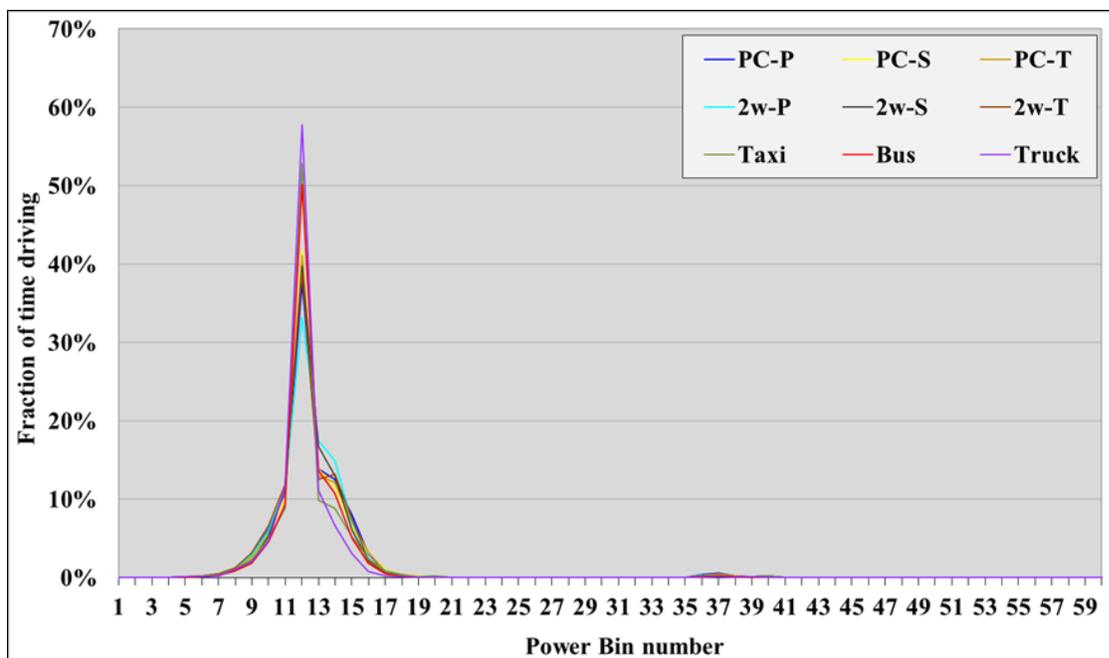


Figure A.2. Power Bin histograms for each vehicle category analyzed in Manizales during IVE driving pattern campaigns. Values for passenger cars (PC) and motorcycles (2w) are shown for three different route types: primary street (P), secondary street (S) and tertiary street (T).

Table A.1. Summary of on-road vehicular study in Manizales.

Data group	Vehicle category	Method / Zone	Data recorded	Field campaign instrument	Periodicity - Sample size
<b>Driving patterns</b>	Passenger car (PC)	GPS / 3 defined circuits in commercial (C1), residential (C2) and industrial (C3) zones	Instantaneous speed, altitude, time and location (latitude, longitude)	Passenger car driven by team member. 9 in total	3 days / circuit 28 routs / circuit / day
	Motorcycle (2w)			Motorcycle driven by team member	2 routs / hour 14 hours / circuit
	Taxi	GPS / Manizales – urban zone		2 Urban taxis in normal operation	2 campaigns of 24 hours
	Bus	GPS / around C1 zone		Urban bus - Bus rider method. 468 bus routes in total	3 days 52 routs / C1 zone / day
		GPS / around C2 zone			3 days 52 routs / C2 zone / day
		GPS / around C3 zone			3 days 28 routs / C3 zone / day
	Truck	GPS / Manizales – urban zone, predominantly industrial area	3 truck vehicles in normal operation	3 complete working time campaigns	
<b>Dynamic vehicle fleet</b>	PC, 2w, Taxi, Bus, Truck	Video camera Secondary information	Number of vehicles per category per hour		Around 80 vehicular counts for all categories
<b>Vehicle start patterns</b>	PC and 2w	Surveys in Manizales – urban zone	Number of starts and time interval between starts		50 vehicles / 7 days
<b>Vehicle technology distribution</b>	PC	Field surveys. Secondary information from vehicle inspection centers.	Vehicle type, model year, fuel type, engine size, odometer reading, engine technology		2996 records
	2w			1027 records	
	Taxi			290 records	
	Bus			678 records	
	Truck			484 records	

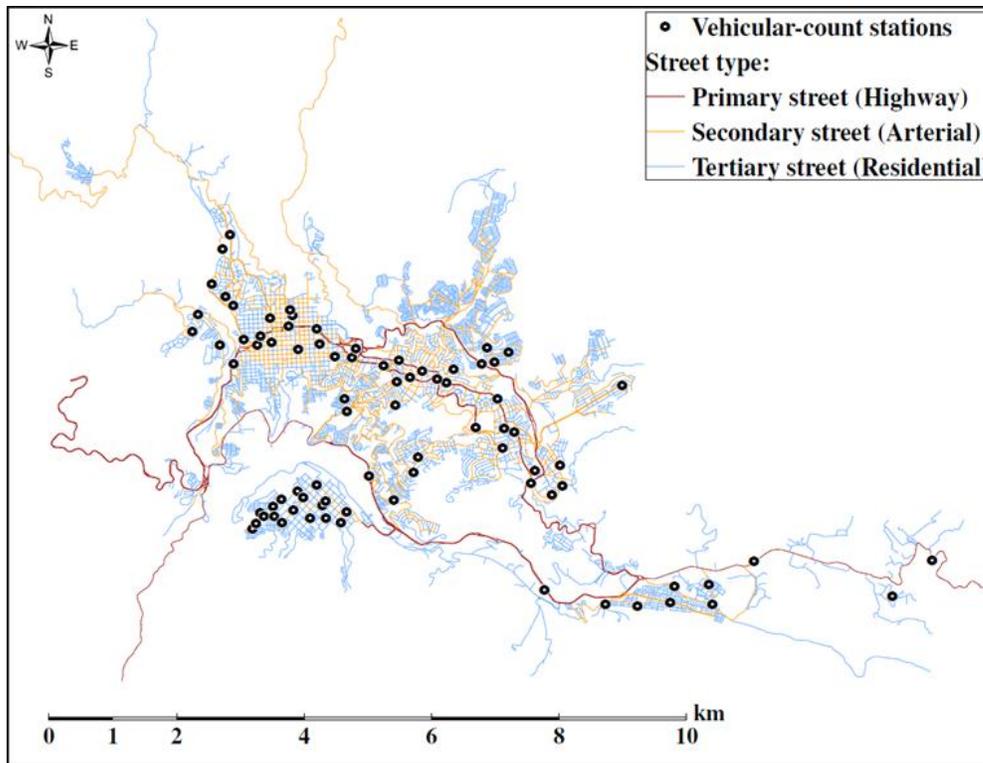


Figure A.3. Spatial distribution of traffic count points in Manizales for dynamic fleet composition analysis.

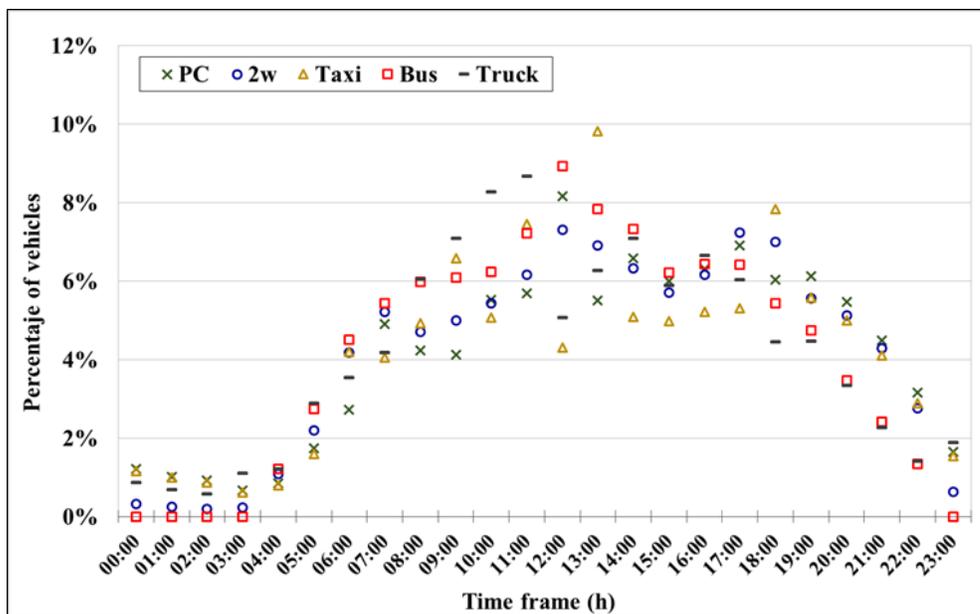


Figure A.4. Dynamic composition of vehicular fleet by hour for a typical working day in Manizales.

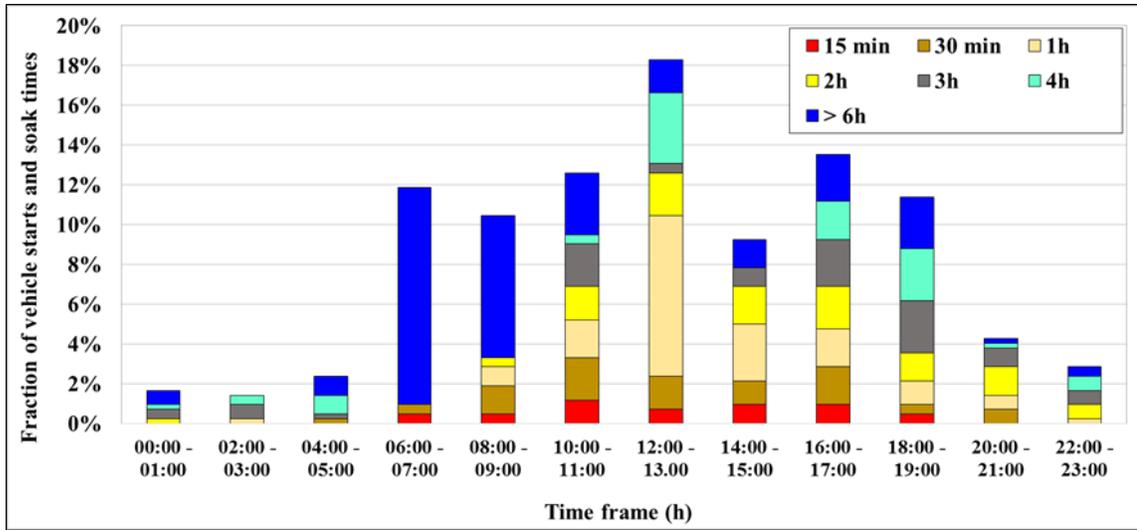


Figure A.5. Fraction of vehicle starts and soak times in Manizales.

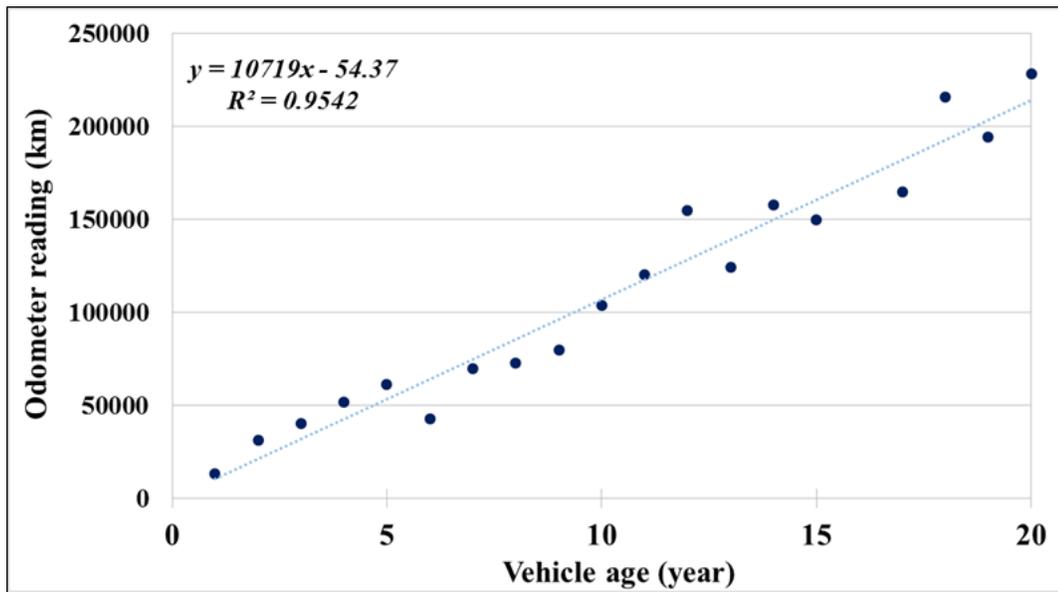


Figure A.6. Distance travelled by passenger cars during the first twenty years of age.

**Table A.2. Vehicle technology distribution obtained in Manizales related with IVE vehicular technology categories.**

<b>Vehicle category</b>	<b>Air/Fuel control</b>	<b>Percentage</b>	<b>Exhaust emission control</b>	<b>Percentage</b>
<b>PC</b>	None	33.4	Carburetor	22.1
	2-Way catalyst	4.5	Single-Pt FI	8.6
	3-Way catalyst	41.6	Multi-Pt FI	55.4
	3-Way/EGR	8.7	Carburetor/Mixer	8.3
	EuroII	4.6	Pre-Chamber Inject.	1.6
	EuroIII	4.1	Direct Injection	3.1
	EGR+Improved	3.1	FI	0.8
<b>2w</b>	2-Cycle engine	54.4	None	54.4
	4-Cycle engine	45.6	Catalyst	45.6
<b>Taxi</b>	None	4.1	Carburetor	0.7
	2-Way catalyst	3.8	Single-Pt FI	0.3
	3-Way catalyst	21.0	Multi-Pt FI	23.4
	3-Way/EGR	64.8	Carburetor/Mixer	71.7
	EuroII	1.7	Pre-Chamber Inject.	0.0
	EuroIII	0.7	Direct Injection	3.8
	EGR+Improved	3.8	FI	0.0
<b>Bus</b>	None	0.3	Pre-Chamber Inject.	0.3
	Improved	94.8	Direct Injection	94.8
	EuroII	4.0	FI	4.9
	EuroIII	0.9		
<b>Truck</b>	None	26.9	Pre-Chamber Inject.	26.9
	Improved	71.7	Direct Injection	71.7
	EuroII	1.4	FI	1.4

*EGR: Exhaust gas recirculation.*

*Single-Pt FI: Single-point fuel injection.*

*Multi-Pt FI: Multi-point fuel injection.*

*FI: Improved fuel injection*

*Pre-Chamber Inject: Original type of fuel injection used on most pre-1995 diesel engines.*

## ANEXO B

### CLASIFICACIÓN DE CATEGORÍAS VEHICULARES EN IVE SEGÚN TAMAÑO DEL VEHÍCULO Y CAPACIDAD DEL MOTOR

Tabla B.1. Clasificación de categorías vehiculares y subcategorías según peso del vehículo y tamaño del motor.

Categoría vehicular – Código según clasificación IVE	Subcategoría	Características
Vehículo particular – Auto/Sml truck	Pequeño – Light	GVWR < 2267.9 kg / Motor < 1500 cc
	Mediano – Medium	GVWR > 2267.9 kg y < 2993.7 kg / Motor < 3000 cc
	Pesado – Heavy	GVWR > 2993.7 kg y < 4082.3 kg / Motor < 3000 cc
Taxi – Auto/Sml truck	Pequeño – Light	GVWR < 2267.9 kg / Motor < 1500 cc
	Mediano – Medium	GVWR > 2267.9 kg y < 2993.7 kg / Motor < 3000 cc
Bus – Truck/Bus	Pequeño – Light	GVWR > 4082.3 kg y < 6350.3 kg
	Mediano – Medium	GVWR > 6350.3 kg y < 14968.6 kg
	Pesado – Heavy	GVWR > 14968.6 kg y < 27215.6
Camión – Truck/Bus	Pequeño – Light	GVWR > 4082.3 kg y < 6350.3 kg
	Mediano – Medium	GVWR > 6350.3 kg y < 14968.6 kg
	Pesado – Heavy	GVWR > 14968.6 kg y < 27215.6
Motocicleta – Sml engine	Pequeño – Light	Motor < 100 cc
	Mediano – Medium	Motor > 100 cc y < 300 cc
	Pesado – Heavy	Motor > 300 cc

## ANEXO C

**CALENDARIO DE INTRODUCCIÓN DE TECNOLOGÍAS VEHICULARES EN COLOMBIA UTILIZADO EN LA DEFINICIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN TECNOLÓGICA DEL PARQUE AUTOMOTOR EN MANIZALES**

Tabla C.1. Calendario de introducción de tecnologías vehiculares en Colombia. Adaptado de Toro et al. (2013) y Rojas (2015).

Tecnología vehicular según tipo de combustible		Año																							
		< 1990	1991	1992	1993	1994	1995	1996	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
Gasolina	Distribución Aire/Combustible	Carburador						SPFI			MPFI (indirecto)											MPFI (directo)			
	Control de emisiones evaporativas	Ninguno						Canister			PCV/Canister														
	Control de emisiones por tubo de escape	Ninguno						2 vías				3 vías						EURO II		EURO III					
Gasolina (motos)	Tipo de motor	2 tiempos												4 tiempos											
	Distribución Aire/Combustible	ninguno												Carburador											
	Control de emisiones evaporativas	Ninguno											PCV												
	Control de emisiones por tubo de escape	Ninguno											1 vía												
Diésel	Distribución Aire/Combustible	Inyección pre cámara	Inyección directa (bombas lineales y rotatorias)																			Common Rail (FI)			
	Control de emisiones por tubo de escape	Pre EURO – EPA 1998 (1990-2000)						EURO I											EURO II / EURO III		EURO IV				

## ANEXO D

### CAMPOS DE INFORMACIÓN INCLUIDOS EN EL DISEÑO DE LA BASE DE DATOS PARA LA ESTIMACIÓN DEL IE POR FUENTES ESTACIONARIAS PUNTUALES

**Tabla D.1. Campos de información incluidos en la base de datos empleada en la estimación del IE por fuentes estacionarias puntuales en Manizales.**

Campos de Grupo	Campos de Subgrupo	Observaciones
Información general de identificación	Número de identificación de industria	Información definida por el equipo de trabajo.
	Número de identificación de punto de emisión	
	Nombre de la empresa	Información definida por el expediente de emisiones.
Número de identificación de expediente de emisiones		
Información general de consulta	Fecha de consulta de expediente de emisiones u otro tipo información	Información definida por el equipo de trabajo según fecha de consulta.
	Fecha de reporte de emisiones	Para aquellas empresas con monitoreo isocinético. Fecha de publicación del estudio.
	Fecha elaboración monitoreo isocinético	Según informe del monitoreo isocinético. Fecha de elaboración del muestreo.
Información general de actividad económica	Actividad Económica	Según documento del DANE: Clasificación Industrial Internacional Uniforme de todas las Actividades Económicas (DANE, 2012).
	Código CIU	
	Tipo de producción	Lista desplegable con sectores productivos definidos según las actividades económicas del DANE. Por ejemplo: bebidas y alimentos, fundición, metalúrgica, entre otros.
	Descripción específica de actividad económica	Según información del expediente ambiental y datos del objeto, misión y visión de la empresa.
Información general del equipo fuente	Tipo de Equipo	Equipo generador de emisiones.
	Descripción y Características	Información específica disponible, como marca, serial, tecnología.
Información sobre ubicación de la empresa	Ubicación geográfica de la empresa	Coordenadas geográficas y planas. Altitud (msnm).
	Dirección	Dirección de ubicación específica reportada
	Zona industrial	Según la zona de ubicación, por ejemplo Maltería, Milán, Centro, Otros.
	Municipio	Se incluye una lista con todos los municipios de Caldas, con fines de ampliación a futuro para todos los municipios del departamento de Caldas.
	Suelo	Tipo de suelo rural o urbano.
Información específica sobre puntos de emisión	Altura de chimenea	Datos de la chimenea de escape de gases.
	Diámetro de chimenea	
	Temperatura	Información de los gases emitidos. Obtenida del informe de emisiones.
	Velocidad	

Campos de Grupo	Campos de Subgrupo	Observaciones
	Caudal	
	Porcentaje de oxígeno	
Información de producción	Producción media, capacidad instalada	Datos de producción para efectos de aplicación de metodología de factores de emisión.
Información sobre combustible y materia prima (MP)	Tipo de combustible	Combustible utilizado en la producción. Por ejemplo: gas natural, carbón, asociado a proceso, entre otros.
	Materia Prima consumida	Referida al combustible o a otro tipo de MP que implique generación de emisiones.
	Consumo y unidad de medida	Cantidad consumida (se reporta en lo posible sobre base anual).
	Frecuencia de Consumo	Unidad(es) que describe la frecuencia de consumo de combustible u otra MP que genere emisión. Por ejemplo jornada de trabajo en horas/día, hora/mes, mes/año.
Información sobre equipo de control de emisiones	Tipo de tecnología	Descripción del sistema de control de emisiones y porcentaje de reducción reportado o teórico.
	Reducción (%)	Información del informe de muestreo isocinético.
Información sobre tipo de estimación y fuente de emisión	Método de Obtención de Emisiones	Ya sea por reporte isocinético, factor de emisión, balances de masa, entre otros.
	Fuente de emisión	Si es proceso de combustión por quema de combustible, combustión asociada al proceso o no combustión.
	Proceso específico asociado a la emisión	Descripción específica del proceso generador de emisiones.
	Tipo de fuente	A la fecha solo se incluyeron fuentes puntuales pero se coloca esta casilla para incluir a futuro otros tipos como fuentes de área por ejemplo.
Información sobre emisiones estimadas	Emisiones de Contaminantes Criterio: CO, NO <sub>x</sub> (NO, NO <sub>2</sub> ), SO <sub>x</sub> (SO <sub>2</sub> , SO <sub>3</sub> ), PM <sub>10</sub>	Se registran las emisiones de contaminantes específicos según cada subgrupo. Las emisiones se reportan en ton/año.
	Emisiones de NMVOC	
	Emisiones de Gases Efecto Invernadero (CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> y N <sub>2</sub> O)	
Información sobre factores de emisión empleados y constantes	Tipo de Factor, Valor y Fuente	Esta información es consignada en una hoja de cálculo paralela.
	Constantes y Factores de Conversión	
Hojas resumen de consulta rápida	Tabla dinámica	Tabla dinámica para consulta rápida según requerimientos del usuario
	Tablas con consolidados por empresa	Hojas con consolidados de emisiones por empresa para contaminantes criterio, GHG y suma de metales

---

## ANEXO E

---

### SUPPLEMENTARY MATERIAL

#### SPATIAL AND TEMPORAL DISAGGREGATION OF THE ON-ROAD VEHICLE EMISSION INVENTORY IN A MEDIUM-SIZED ANDEAN CITY. COMPARISON OF GIS-BASED TOP-DOWN METHODOLOGIES

##### Content

##### Figures

**Figure A.1.** Relative difference in disaggregation factors using direct traffic counts. Results exhibit areas of overestimation and underestimation (shown in red and blue) – demonstrating the importance of using traffic count classification.

**Figure A.2.** Thiessen polygons traced for every vehicle category and road type.

**Figure A.3.** Dynamic composition of vehicular fleet by hour for a typical working day in Manizales. Values obtained from Gonzalez et al. (2017).

**Figure A.4.** Disaggregation factors of each vehicle category using reference TCC method. a) Passenger cars per type of road. b) Motorcycles per type of road. c) Taxi. d) Bus. e) Truck.

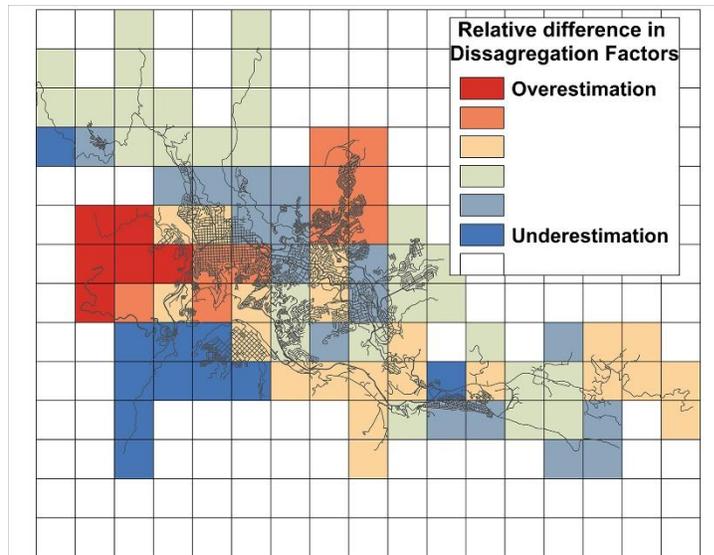
**Figure A.5.** Disaggregation factors obtained for simplified methods.

**Figure A.6.** Spatial distribution of emissions using reference methods. a) Carbon monoxide (CO). b) Particulate matter (PM<sub>10</sub>). c) Nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>). d) Sulfur oxides (SO<sub>x</sub>). d) Non-methane volatile organic compounds (NMVOC).

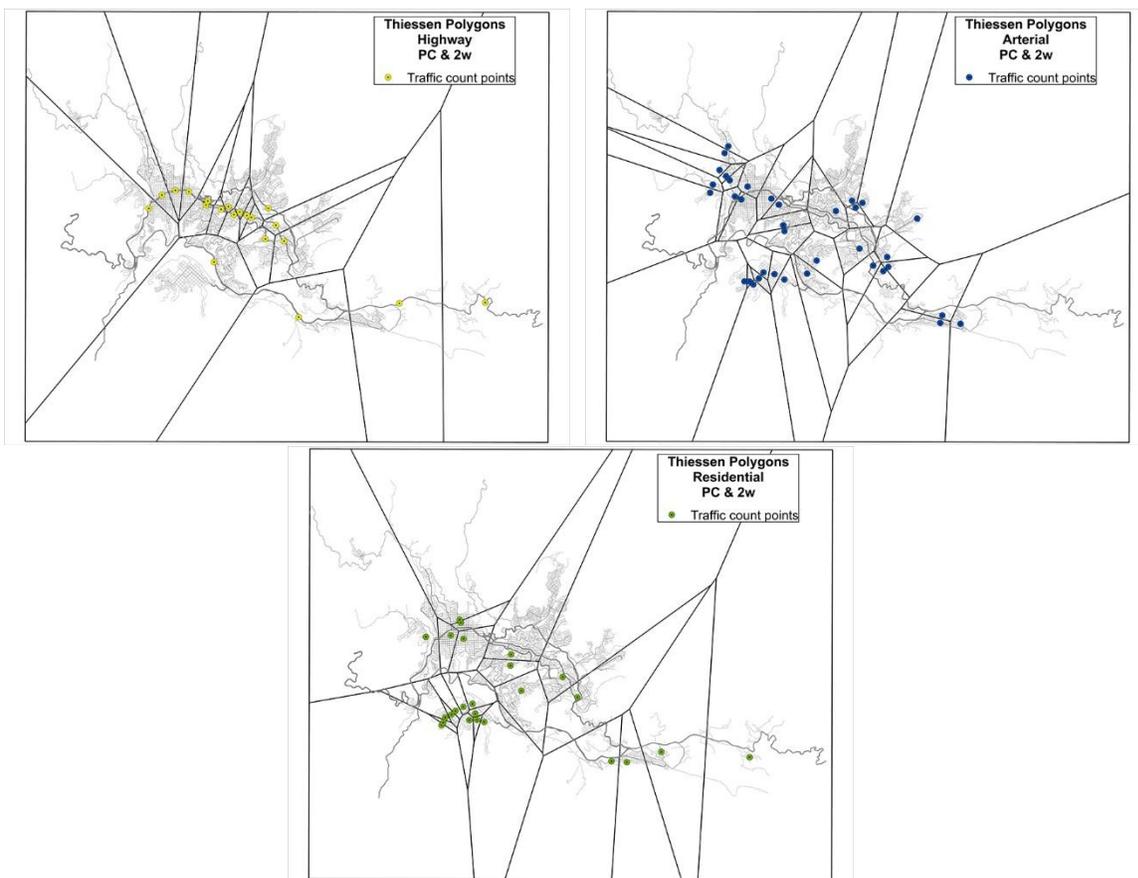
**Figure A.7.** Relative differences in emissions between reference method and simplified methodologies. a) Differences in CO emissions. b) Differences in PM<sub>10</sub> emissions.

##### Tables

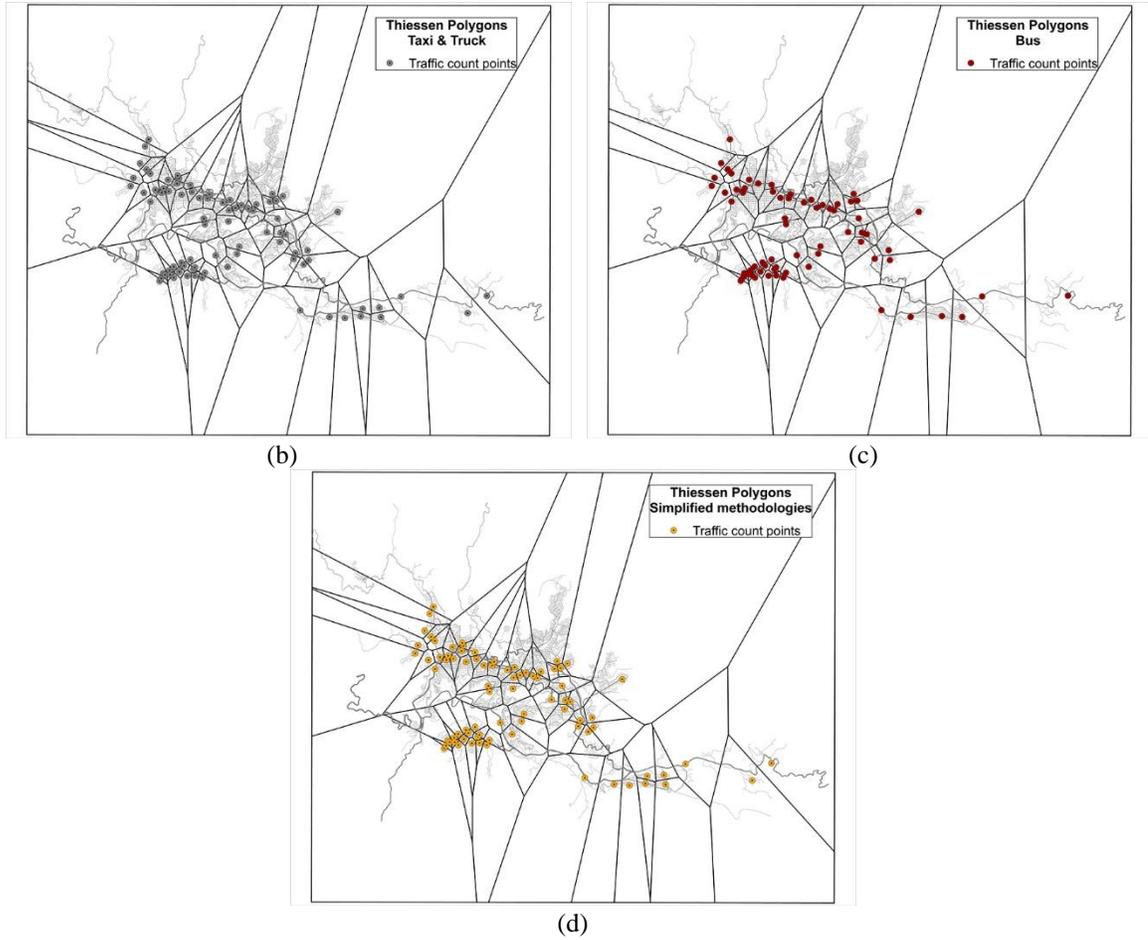
**Table A.1.** Traffic flow levels for passenger cars at 12h and the intervals define by Jenks natural breaks optimization method for reference TCC method.



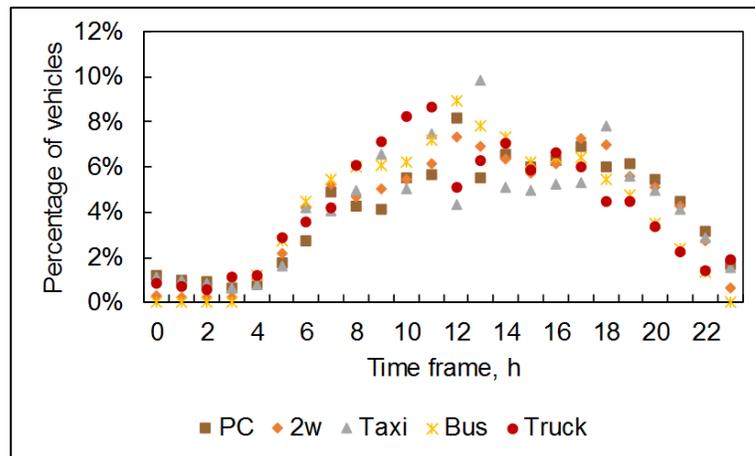
**Figure A.1. Relative difference in disaggregation factors using direct traffic counts. Results exhibit areas of overestimation and underestimation (shown in red and blue) – demonstrating the importance of using traffic count classification.**



(a)



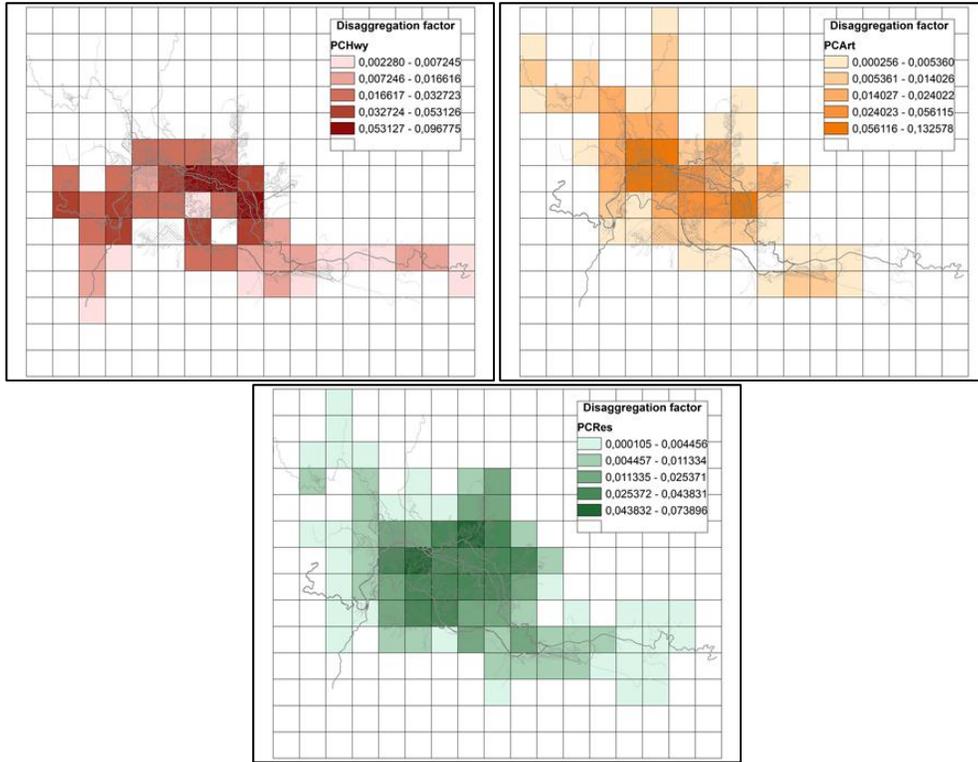
**Figure A.2. Thiessen polygons traced for every vehicle category and road type. a) Passenger cars (PC) and motorcycles (2w) in every road type. b) Taxi and truck. c) Bus. d) Simplified methodologies.**



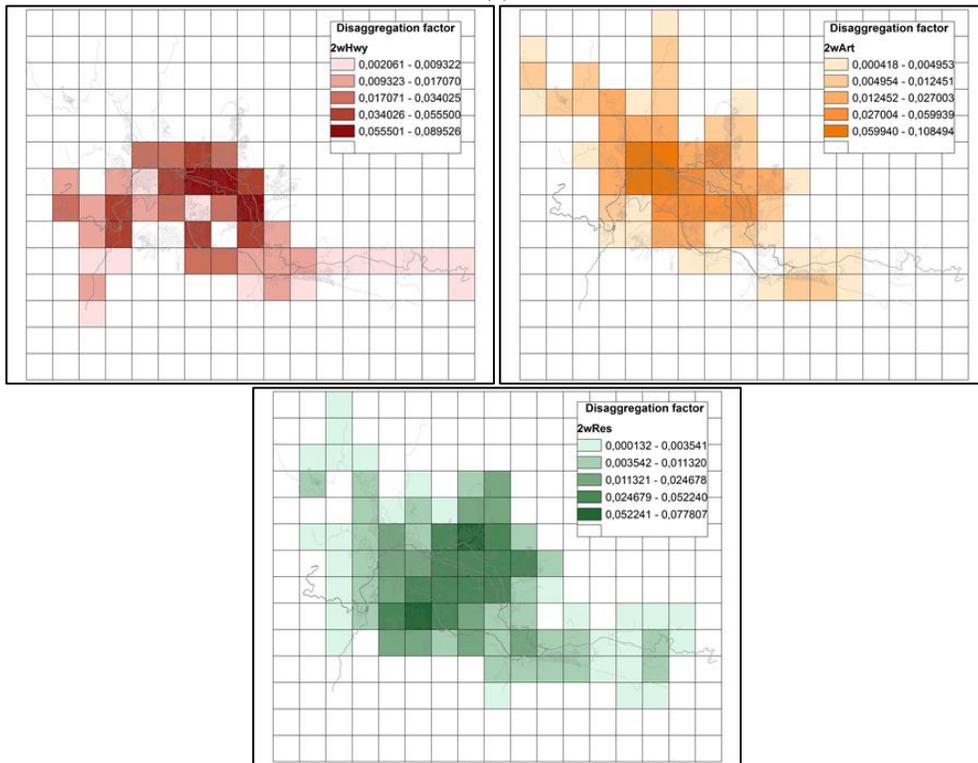
**Figure A.3. Dynamic composition of vehicular fleet by hour for a typical working day in Manizales. Values obtained from Gonzalez et al. (2017).**

**Table A.1. Traffic flow levels for passenger cars at 12h and the intervals define by Jenks natural breaks optimization method for reference TCC method.**

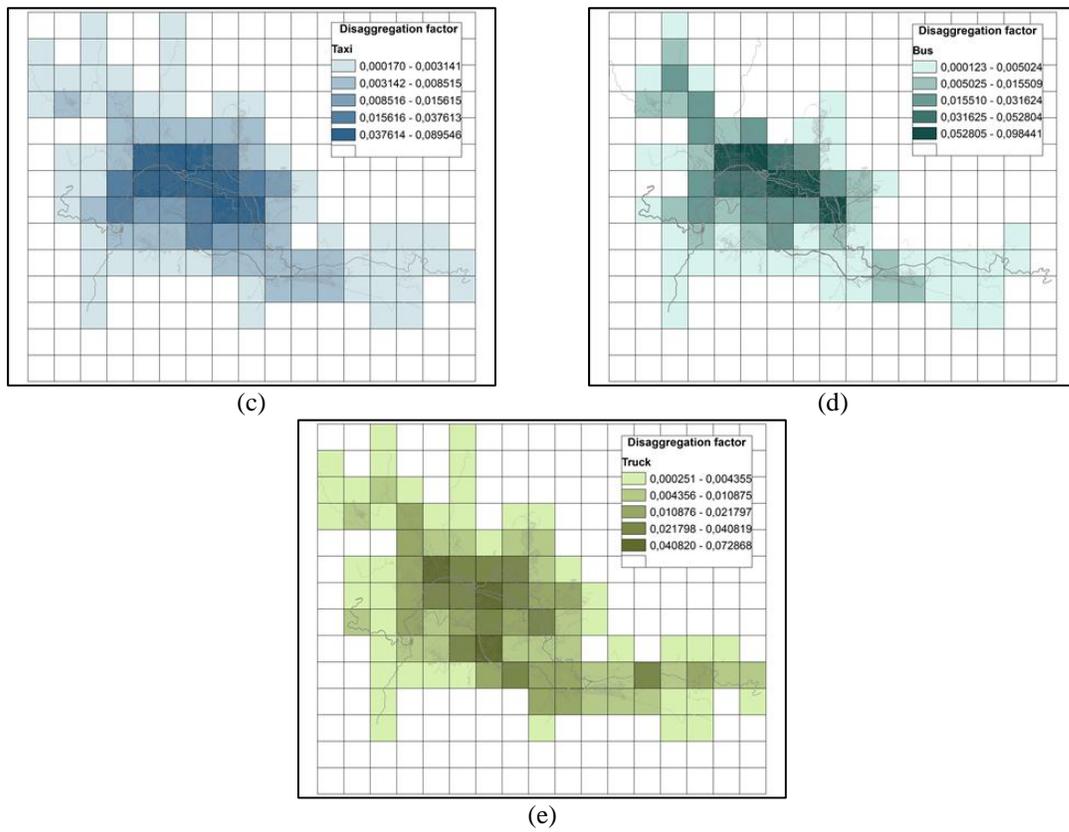
Vehicle category	Traffic flow level	Traffic flow intervals (veh/day)			Classification factor (f)
		Lower	Upper	Mean	
PCHwy	Low	82	1023	614	1
	Medium	1023	1870	1557	3
	High	1870	4768	4768	8
PCArt	Low	30	359	193	1
	Medium	359	693	574	3
	High	693	1097	1083	5
PCRes	Low	13	75	45	1
	Medium	75	172	136	3
	High	172	239	227	5
2wHwy	Low	33	398	223	1
	Medium	398	753	666	3
	High	753	1214	1001	4
2wArt	Low	31	132	89	1
	Medium	132	301	185	2
	High	301	582	450	5
2wRes	Low	9	69	36	1
	Medium	69	112	105	3
	High	112	284	206	6
Taxi	Low	2	85	34	1
	Medium	85	255	172	5
	High	255	974	381	11
Bus	Low	0	190	52	1
	Medium	190	589	368	7
	High	589	2134	2134	41
Truck	Low	1	28	11	1
	Medium	28	56	46	4
	High	56	128	96	8



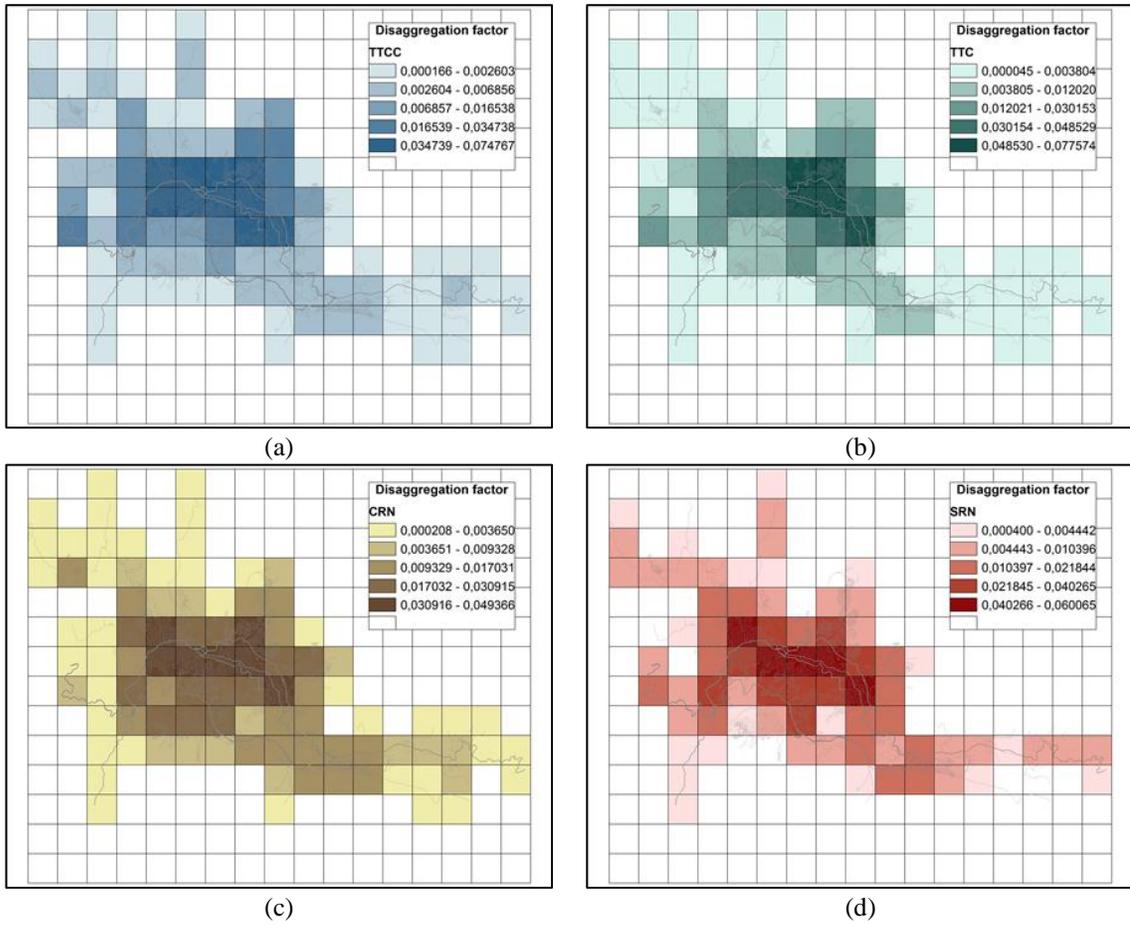
(a)



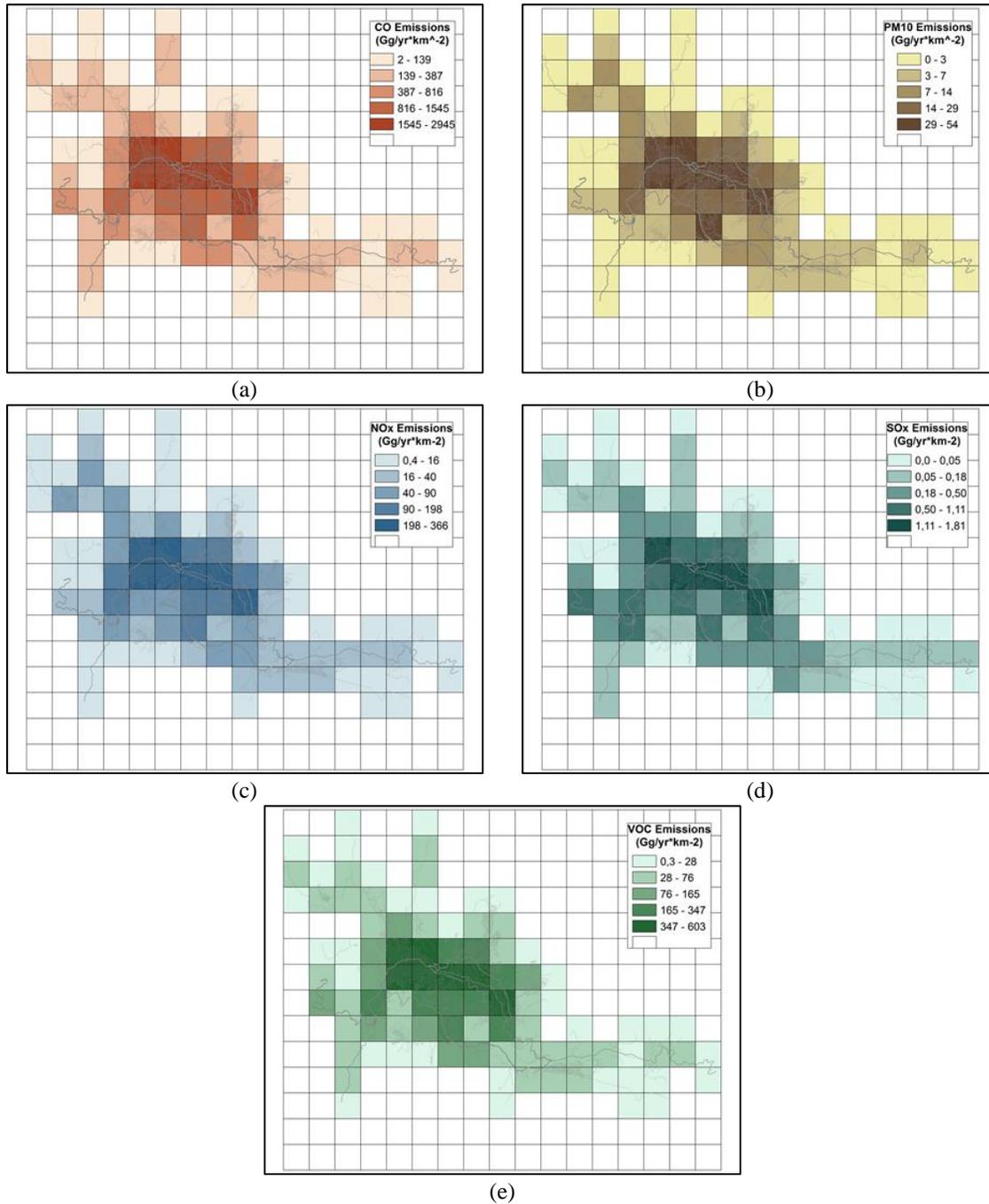
(b)



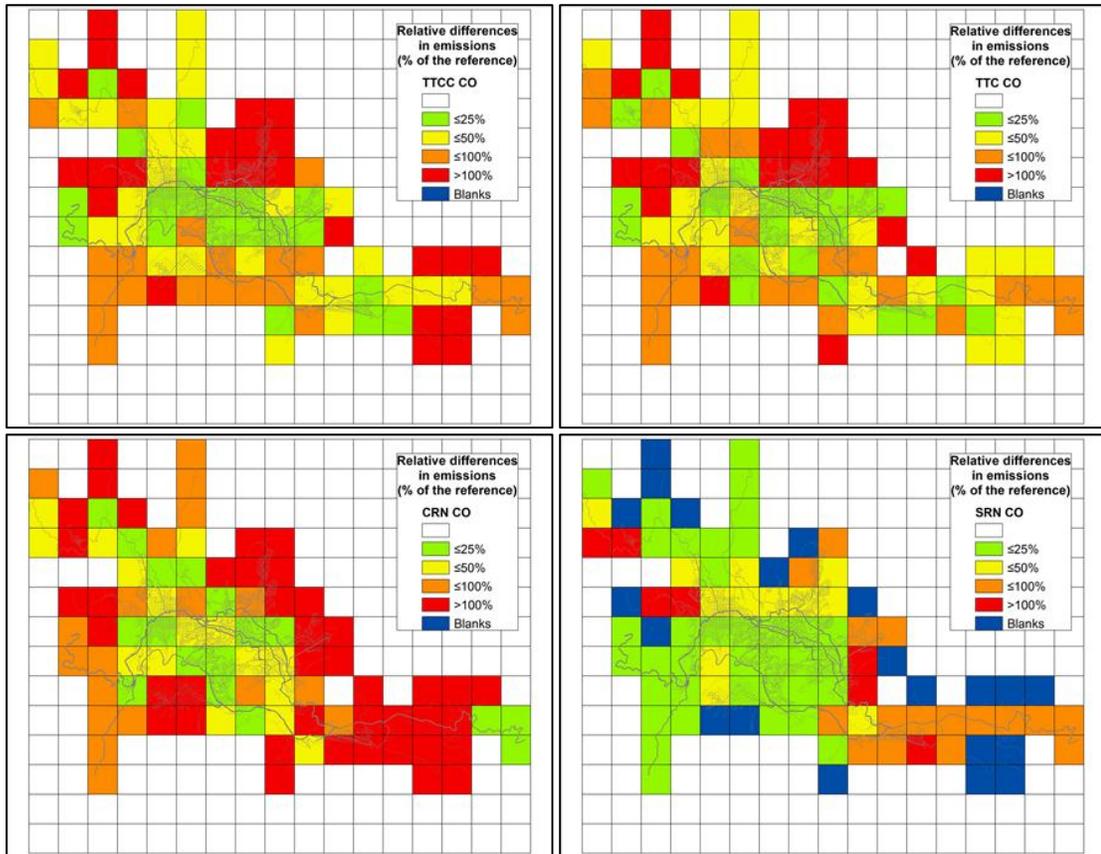
**Figure A.4. Disaggregation factors of each vehicle category using reference TCC method. a) Passenger cars per type of road. b) Motorcycles per type of road. c) Taxi. d) Bus. e) Truck.**



**Figure A.5. Disaggregation factors obtained for simplified methods. a) TTCC. b) TTC. c) CRN. d) SRN.**



**Figure A.6. Spatial distribution of emissions using reference methods. a) Carbon monoxide (CO). b) Particulate matter (PM<sub>10</sub>). c) Nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>). d) Sulfur oxides (SO<sub>x</sub>). d) Non-methane volatile organic compounds (NMVOC).**



(a)

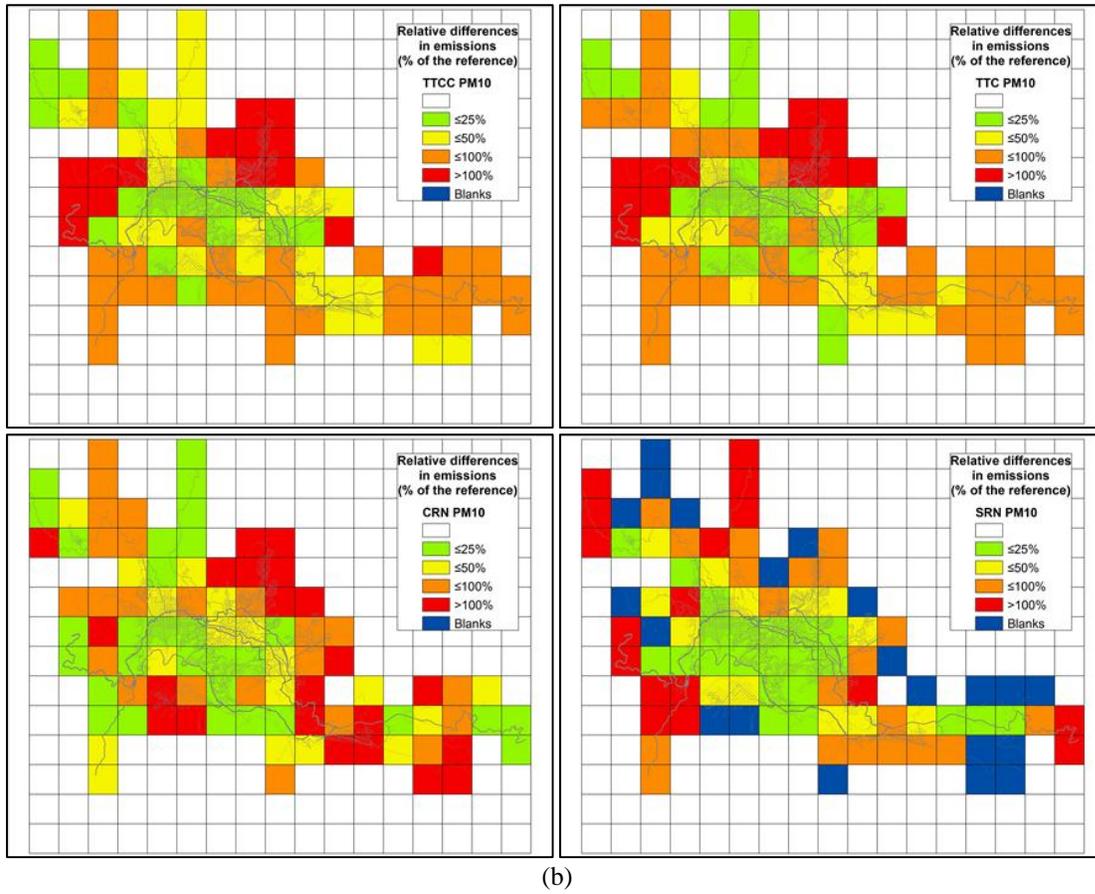


Figure A.7. Relative differences in emissions between reference method and simplified methodologies.  
a) Differences in CO emissions. b) Differences in PM<sub>10</sub> emissions.

## ANEXO F

### DISTRIBUCIÓN DE ESPECIES QUÍMICAS PARA NMVOC EN EL MECANISMO QUÍMICO RADM2 POR EMISIÓN VEHICULAR.

**Tabla F.1. Distribución de especies químicas para NMVOC en el mecanismo químico RADM2. Masa por cada 100g de VOC emitido por fuentes móviles en ruta para Manizales. Datos tomados del estudio de Vara-Vela (2013).**

Especie	Identificación en WRF-Chem	Gasolina (mol/100g VOC emitido)			Diesel (mol/100g VOC emitido)		
		Vapor	Líquido	Exhosto	Vapor	Líquido	Exhosto
1. Acetaldehídos y Aldehídos	e_ald	0	0	0.08556	0	0	0.10752
2. Formaldehído	e_hcho	0	0	0.07628	0	0	0.29176
3. Ácidos orgánicos	e_or2	0	0	0	0	0	0
4. Alcanos 500<kOH<5000	e_hc3	0.22762	0.02132	0.36673	0	0	0.149
5. Alcanos 5000<kOH<10000	e_hc5	0.44454	0.1473	0.13002	0	0	0.05774
6. Alcanos kOH>10000	e_hc8	0	0.19263	0.06274	0	0	0.12191
7. Etano kOH<500	e_eth	0	0	0.23166	0	0	0
8. Etileno	e_ol2	0	0	0.28	0	0	0.15757
9. Alquenos kOH<20000	e_olt	0.16132	0.07205	0.11739	0	0	0.38532
10. Alquenos kOH>20000	e_oli	0.39558	0.16985	0.1323	0	0	0
11. Aromáticos kOH<20000	e_tol	0.0128	0.04835	0.11517	0	0	0.23512
12. Aromáticos kOH>20000	e_xyl	0	0.09793	0.14906	0	0	0.00836
13. Acetona y cetonas	e_ket	0.32559	0.59508	0.3082	0	0	0.0185
14. Fenoles y cresoles	e_csl	0	0	0	0	0	0
15. Isopreno	e_iso	0	0.00115	0.00373	0	0	0

## ANEXO G

### DISTRIBUCIÓN ESPACIAL DE CONCENTRACIONES DE SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> Y O<sub>3</sub> EN EL AIRE AMBIENTE DE MANIZALES

A.P. Cuesta<sup>a</sup>, C.M. González<sup>a\*</sup>, M. Velasco<sup>b</sup>, B.H. Aristizábal<sup>a\*\*</sup>

<sup>a</sup>Grupo de Trabajo Académico en Ingeniería Hidráulica y Ambiental (GTAIHA), Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, Carrera 27 64-60. Manizales, Colombia.

<sup>b</sup>Corporación Autónoma Regional de Caldas, CORPOCALDAS.

*Manuscrito aceptado en la Revista Internacional de Contaminación Ambiental.*

#### Resumen

Los perfiles espaciales de las concentraciones en aire de dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>), óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>) y ozono troposférico (O<sub>3</sub>), fueron determinados mediante el uso de muestreadores pasivos en la ciudad andina de Manizales, Colombia. Este estudio se realizó con el propósito de establecer una línea base de las concentraciones de estos contaminantes y analizar la posible influencia de fuentes locales de emisión (naturales y antropogénicas). Las mediciones se realizaron en doce puntos de monitoreo distribuidos entre el área urbana y el área rural de la ciudad, considerando la dirección del viento sobre la que se dispersa la pluma del volcán activo Nevado del Ruíz. Se realizaron tres campañas de monitoreo con una duración de cuatro semanas cada una. Las concentraciones promedio de SO<sub>2</sub> variaron entre 4.1 µg/m<sup>3</sup> y 9.8 µg/m<sup>3</sup> en los diferentes puntos, con puntos de mayor concentración que sugieren influencia de la actividad industrial y el volcán Nevado del Ruíz. Las concentraciones promedio de NO<sub>x</sub> variaron en un intervalo de 5.9 µg/m<sup>3</sup> a 82.2 µg/m<sup>3</sup>, con mayores concentraciones en los puntos influenciados por un alto flujo vehicular. Las concentraciones de O<sub>3</sub> variaron entre 16.1 µg/m<sup>3</sup> y 68.1 µg/m<sup>3</sup>, encontrándose las mayores concentraciones de O<sub>3</sub> en los puntos del área rural.

**Palabras clave:** muestreadores pasivos, dióxido de azufre, óxidos de nitrógeno, ozono.

#### 1. Introducción

La exposición a contaminantes del aire en centros poblados se ha vinculado con incrementos en los niveles de morbilidad y mortalidad (OPS 2005). Según la Organización Mundial de la Salud (OMS), en el año 2012 cerca de 3 700 000 muertes se produjeron en el mundo por la contaminación del aire (OMS 2014). En Colombia, el Diagnóstico Nacional de Salud Ambiental indicó que en el periodo 2010-2011, más de 17 000 casos de muertes se relacionaron potencialmente con la contaminación del aire (MADS 2012).

El SO<sub>2</sub> es un contaminante emitido por procesos de combustión en el transporte, plantas de generación de energía eléctrica, procesos industriales, erupciones y desgasificación de volcanes activos (Klimont et al. 2013). Se estima que los volcanes generan anualmente entre el 13 y 20 % de las emisiones globales de SO<sub>2</sub>, influenciando la calidad del aire de más de 400 000 000 de personas (Halmer et al. 2012). El SO<sub>2</sub> es removido de la atmósfera mediante deposición húmeda y seca, su tiempo de vida media es aproximadamente de 25 horas (Seinfeld y Pandis 2006). Los NO<sub>x</sub> son un grupo de gases formados por nitrógeno y oxígeno (NO<sub>2</sub>, NO, entre otros), emitidos en la quema de combustibles fósiles en vehículos en ruta y plantas de generación de energía (Vallero 2014) y participan en la formación de ozono mediante reacciones fotoquímicas. El tiempo de vida media de

los NO<sub>x</sub> varía desde pocas horas en días soleados, hasta varios días en periodos húmedos. Tanto el NO<sub>2</sub> como el SO<sub>2</sub> reaccionan con agua en la atmósfera formando nitratos y sulfatos, componentes de la lluvia ácida (Seinfeld y Pandis 2006). El ozono (O<sub>3</sub>) es un contaminante secundario producto de reacciones químicas entre COVs, CH<sub>4</sub> y NO<sub>x</sub>, por lo que sus concentraciones dependen de la disponibilidad de precursores y la radiación solar, indispensable para su formación. Los radicales OH están involucrados en el mecanismo de formación de O<sub>3</sub>. Bajo ciertas condiciones, los OH pueden preferir reaccionar con los COVs favoreciendo la formación de O<sub>3</sub> (Seinfeld y Pandis 2006). La ruta seguida por los OH depende de la relación inicial de concentraciones COVs/NO<sub>x</sub>. Una relación COVs/NO<sub>x</sub> alta (típica en áreas suburbanas y rurales), favorece la formación de O<sub>3</sub> por la reacción OH-COV. En contraste, una relación COVs/NO<sub>x</sub> baja (típica en centros urbanos) desfavorece la producción del contaminante (Finlayson-Pitts y Pitts 1993).

Entre las técnicas mayormente empleadas para medir contaminantes del aire están: la filtración para el monitoreo de partículas, los analizadores automáticos y el monitoreo pasivo, para monitoreo de gases. Los muestreadores pasivos no cuentan con un sistema de bombeo que transporte la muestra hasta el medio colector o adsorbente, por lo que no requieren suministro de energía eléctrica (Tiwary y Colls 2010). Al existir un gradiente de concentración entre la atmósfera libre y el muestreador pasivo, el movimiento del gas será proporcional al gradiente de concentración, lo que permite la recolección de contaminante (Vallero 2014).

$$F = D * \frac{A}{L_d} (C_0 - C) \quad (1)$$

Según la ley de Fick (ecuación 1), la velocidad de adsorción se relaciona con el área interna de la sección transversal del muestreador, la longitud de la superficie y el tiempo de exposición. En la ecuación 1, F es la masa del analito recolectada por el muestreador en el tiempo, D es el coeficiente difusivo del analito, A es el área de la sección transversal de la barrera difusiva, L<sub>d</sub> es la longitud de la superficie de difusión, C es la concentración del analito cerca de la superficie de difusión, y C<sub>0</sub> es la concentración del analito en proximidades a la entrada de la barrera difusiva. De la ecuación 1 es posible conocer la concentración del contaminante, si se conoce principalmente su coeficiente de difusión y el tiempo de exposición.

Los muestreadores pasivos son más económicos en comparación con otros sistemas como los analizadores automáticos, no necesitan complejas instalaciones técnicas y miden concentraciones de contaminantes en periodos relativamente largos: su tiempo efectivo de monitoreo varía entre 8 horas y 30 días (Gaga et al. 2012, Érseková et al. 2014). Los muestreadores pasivos pueden suplir grandes requerimientos de muestreo, abarcando múltiples ubicaciones, lo que permite evaluar la distribución espacial y temporal de contaminantes. Estos muestreadores se han empleado para medir la exposición de un individuo (Palmer y Gunnison 1973, Brown 1981), conocer la variación espacial y temporal de concentraciones en áreas rurales y urbanas (Zapata et al. 2008, Meng et al. 2010, Herrera et al. 2014), e identificar zonas que pueden requerir monitoreo continuo (Galán et al. 2001).

La medición de contaminantes en el aire de Manizales se justifica por la presencia de fuentes de emisiones antropogénicas y naturales: 1) vehículos motorizados -371 vehículos/1000 habitantes- (Manizales cómo vamos 2016), que emplean gasolina, diésel y gas natural, emitiendo 26 t/año de SO<sub>x</sub> y 4890 t/año de NO<sub>x</sub> (González et al. 2017), 2) actividad industrial (metalurgia, manufactura y producción de comestibles), que genera anualmente 113.5 t/año de SO<sub>x</sub> y 89.5 t/año de NO<sub>x</sub> (González et al. 2017) y 3) el volcán activo Nevado del Ruiz a 28 km de la ciudad, con una emisión mayor a 2 000 000 t de SO<sub>2</sub> en 2015 (SGC 2015). Las características geográficas y meteorológicas locales también promueven estudios de calidad del aire: Manizales se ubica entre marcadas pendientes que limitan el área de expansión poblacional; la dispersión de contaminantes se minimiza por velocidades de viento menores a 2 m/s.

El Sistema de Vigilancia de Calidad del Aire de Manizales monitorea automáticamente las concentraciones de  $\text{SO}_2$  y  $\text{O}_3$  en el centro administrativo local. Sin embargo, hasta la fecha no se han reportado estudios evaluando la distribución espacial de concentraciones de gases contaminantes en la ciudad y la influencia de las fuentes de emisiones locales. El objetivo de este trabajo fue medir las concentraciones en aire de  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_x$  y  $\text{O}_3$  empleando muestreadores pasivos, para obtener una distribución espacial y temporal de sus concentraciones en área urbana y rural de Manizales, durante el periodo 2015-2016.

## 2. Materiales y Métodos

### 2.1. Área de estudio

Manizales es una ciudad colombiana ubicada sobre la cordillera de los Andes (2150 msnm). Esta ciudad intermedia –población urbana de 368 000 hab–, posee una alta densidad poblacional con 6800 hab/km<sup>2</sup>. La temperatura media en Manizales es de 18 °C. Durante el año la ciudad presenta una variabilidad climática influenciada por El Niño y La Niña (Vélez et al. 2015). A lo largo del día la temperatura puede variar entre 12 y 25 °C, la humedad relativa entre 40 y 100 % y la radiación solar alcanza los 1400 W/m<sup>2</sup>.

Las principales fuentes locales de contaminación atmosférica son la industria, los vehículos en ruta y el volcán activo Nevado del Ruiz (**Fig. 1**). El volcán constantemente emite gases y ceniza (desgasificación) (SGC 2015), tiene una altura máxima de 5321 msnm. A nivel regional se ha evidenciado la existencia de un tipo de movimiento de vientos que varía entre horas diurnas y nocturnas, como consecuencia de la orografía local: en el día, los vientos se mueven ascendentemente desde la ciudad hacia la cordillera donde se ubica el Nevado del Ruíz. En la noche este patrón se invierte y los vientos se mueven predominantemente desde la cordillera hacia la ciudad (Cortés 2010), asociado con el ciclo diurno solar y su efecto termodinámico sobre el aire.

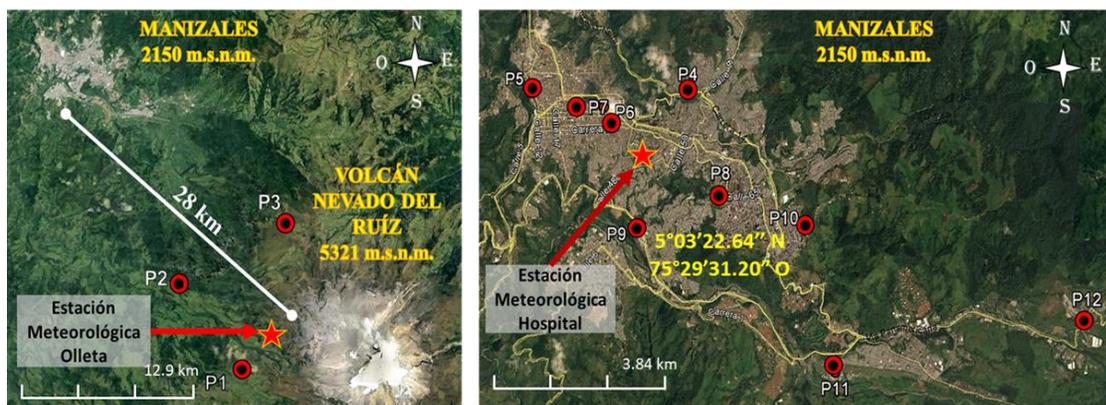
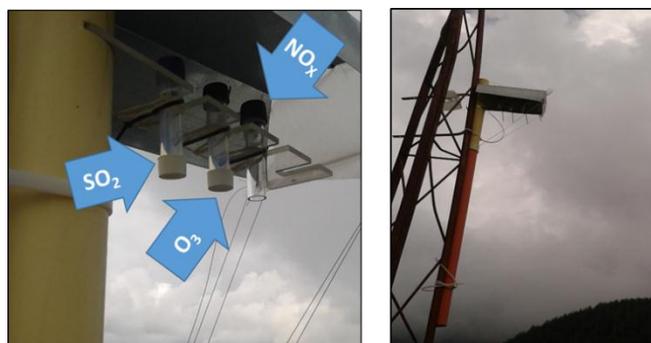


Figura 1. Área de estudio y ubicación puntos de monitoreo pasivo

### 2.2. Muestreadores Pasivos

Los muestreadores pasivos fueron adquiridos a la empresa Ormantine USA Ltd. En cada punto de monitoreo se instalaron tres muestreadores pasivos para medir las concentraciones de cada gas ( $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_x$  y  $\text{O}_3$ ; **Fig. 2**), a una altura no menor a 3 m, lejos de obstáculos como edificios o árboles para evitar perturbaciones mecánicas. El **cuadro I** presenta información técnica de cada tipo de muestreador.



**Figura 2. Configuración puntos de monitoreo pasivo.**

**Cuadro I. Especificaciones de los muestreadores pasivos.**

	Muestreador SO <sub>2</sub>	Muestreador NO <sub>x</sub>	Muestreador O <sub>3</sub>
<b>Material de fabricación</b>	Polímero de etileno fluorado	Acrílico	Polímero de etileno fluorado
<b>Adsorbente</b>	Carbonato de potasio	Trietanolamina	1,2-di(4-piridil)-etileno
<b>Método de análisis</b>	Cromatografía	Espectroscopía UV/Visible	Cromatografía
<b>Tiempo de exposición recomendada por el fabricante</b>	2 a 4 semanas	2 a 4 semanas	2 a 4 semanas
<b>Límite de detección</b>	< 2 µg/m <sup>3</sup> <sup>a</sup>	< 1.5 µg/m <sup>3</sup> <sup>a</sup>	< 10 µg/m <sup>3</sup> <sup>a</sup>
<b>Influencia velocidad del viento</b>	Despreciable <sup>b</sup>	< 10 % entre 1 y 4.5 m/s	Despreciable <sup>b</sup>
<b>Dimensiones</b>	71 mm longitud * 11 mm de diámetro		

<sup>a</sup> Sobre un periodo de exposición de cuatro semanas.

<sup>b</sup> El tubo está equipado con un filtro, por lo tanto la influencia de la velocidad del viento es despreciable.

Considerando las recomendaciones del proveedor, los muestreadores estuvieron expuestos al ambiente durante cuatro semanas. Las fechas, horas de inicio y fin de los monitoreos fueron registradas. Previo y posterior a cada monitoreo, los muestreadores fueron almacenados a una temperatura de 5 °C. Al finalizar cada campaña, los tubos muestreadores se enviaron al proveedor en Florida, Estados Unidos para los análisis de laboratorio que determinaron las concentraciones de cada contaminante. Los métodos de laboratorio empleados se encuentran bajo la certificación ISO 9001 e ISO 17025: los muestreadores de SO<sub>2</sub> y O<sub>3</sub> se analizaron por cromatografía iónica (equipo Dionex ICS3000 ICU5), y los muestreadores de NO<sub>x</sub> por espectroscopía UV/Visible (equipo UVS04 Camspec M550). En cada campaña se utilizaron tres muestreadores blanco de desplazamiento (travelling blanks, en inglés), los cuales no estuvieron expuestos en los sitios de monitoreo, pero se mantuvieron almacenados a 5 °C y se retornaron al laboratorio del proveedor al finalizar cada campaña, junto a los tubos expuestos, para su análisis. Las concentraciones medidas en los tubos blanco de desplazamiento se restaron a las concentraciones medidas en los tubos expuestos.

### 2.3. Red de monitoreo

Teniendo en cuenta la presencia del volcán Nevado del Ruíz, tres puntos de monitoreo se ubicaron en zona rural de Manizales y Villamaría en el departamento de Caldas, Colombia, considerando la dirección predominante de dispersión de la pluma volcánica: al noroeste del cráter (localización de Manizales y punto de monitoreo P2), al oeste y norte del volcán (P1 y P3, respectivamente). Nueve

puntos de monitoreo se ubicaron en la zona urbana, procurando evaluar sectores de tipo residencial (P4, P8, P9, P10, P11), comercial (P5, P6, P7) e industrial (P12) (**Fig. 1**). El **cuadro II** presenta el listado de puntos de monitoreo y sus características.

**Cuadro II. Puntos de monitoreo pasivo.**

Punto de Monitoreo Pasivo		Tipo de Zona	Principal Fuente de Influencia	Ubicación	Altitud (m.s.n.m.)	Distancia Aprox. al Volcán (km)
ID	Lugar					
<b>Área rural</b>						
<b>P1</b>	La Fonda	Rural	Volcán N. del Ruíz	4°52'11.1" N 75°24'7.3" O	3647	9
<b>P2</b>	Hostal La Laguna	Rural	Volcán N. del Ruíz	4°55'53.8" N 75°28'1.4" O	2350	17
<b>P3</b>	Hacienda Termales	Rural	Volcán N. del Ruíz	4°58'3.2" N 75°22'26.3" O	3661	11
<b>Área urbana</b>						
<b>P4</b>	Piamonte	Residencial norte	Tráfico vehicular alto	5°4'15.6" N 75°29'52.8" O	2087	28
<b>P5</b>	S.G.C.	Comercial noroeste	Tráfico vehicular alto	5°4'17.4" N 75°31'27.6" O	2219	29
<b>P6</b>	S.C.A.	Comercial noroeste	Tráfico vehicular alto	5°4'7.7" N 75°30'44.6" O	2161	29
<b>P7</b>	Gobernación	Comercial noroeste	Tráfico vehicular alto	5°4'6.5" N 75°31'1.7" O	2258	29
<b>P8</b>	Palogrande	Residencial centro	Tráfico vehicular medio	5°3'22.4" N 75°29'31.3" O	2154	26
<b>P9</b>	Terminal	Residencial suroeste	Tráfico vehicular alto	5°3'2.5" N 75°30'25.2" O	1893	26
<b>P10</b>	Niza	Residencial este	Tráfico vehicular bajo	5°3'5.3" N 75°28'35.4" O	2251	25
<b>P11</b>	Nubia	Residencial sureste	Tráfico vehicular bajo	5°1'47.0" N 75°28'18" O	2091	22
<b>P12</b>	Maltería	Industrial sureste	Parque industrial	5°2'11.4" N 75°25'51.5" O	2325	21

#### 2.4. Campañas de monitoreo

Se realizaron tres campañas de monitoreo pasivo entre los años 2015 (campaña 1: 29 de enero a 27 de febrero, campaña 2: 05 de noviembre a 04 de diciembre) y 2016 (campaña 3: 19 de febrero a 18 de marzo) (**Cuadro III**). Durante las tres campañas se conservaron los doce puntos de medición, a excepción de P4 y P12, que se incorporaron en la campaña 2 por reconsideraciones técnicas. Cada campaña tuvo una duración aproximada de cuatro semanas. La selección de los periodos de monitoreo se realizó considerando el comportamiento bimodal anual de las lluvias en la región, para evaluar la variación en las concentraciones de los gases entre periodos predominantemente secos

(enero-febrero) y periodos predominantemente lluviosos (noviembre). También se evaluó la influencia de las emisiones volcánicas de SO<sub>2</sub> sobre las concentraciones medidas de éste contaminante.

**Cuadro III. Características de campañas de monitoreo pasivo.**

	Campaña 1		Campaña 2		Campaña 3	
<b>Fecha de inicio</b>	29 Enero 2015		05 Noviembre 2015		19 Febrero 2016	
<b>Fecha de finalización</b>	27 Febrero 2015		04 Diciembre 2015		18 Marzo 2016	
<b>Condiciones meteorológicas</b>	<b>Área urbana</b>	<b>Área rural</b>	<b>Área urbana</b>	<b>Área rural</b>	<b>Área urbana</b>	<b>Área rural</b>
Temperatura media (°C)	18	10	16	7	18	9
Humedad relativa media (%)	91	*	96	*	89	*
Precipitación total acumulada (mm)	92	131	169	186	107	126
Radiación solar media (W/m <sup>2</sup> )	375	100	347	90	364	116
<b>Volcán</b>	Emisión promedio de SO <sub>2</sub> (t/día)		1252		1293	
			1433			

\* Valores de humedad relativa no están disponibles para el área rural.

## 2.5. Información meteorológica

Datos de temperatura, dirección y velocidad del viento, precipitación y radiación solar de la zona urbana (**Cuadro III**), se obtuvieron del Centro de Datos Ambientales de Caldas (cdiac.manizales.unal.edu.co). La información meteorológica del área urbana corresponde a la estación Hospital (5°03'46" N 75°30'00.6" O, 2125 msnm). Para el área rural (**Cuadro III**), se emplearon datos de la estación meteorológica Olleta (4°53'32" N 75°21'28" O, 4600 msnm.), operada por el Servicio Geológico Colombiano, ubicada al oeste del cráter activo del volcán (4°53'30" N 75°19'06" O, 5320 msnm).

## 2.6. Análisis de datos

Los resultados se analizaron en el programa R versión 3.1.3. Se usaron estadísticos descriptivos para resumir el comportamiento de variables de concentración de contaminantes y condiciones meteorológicas. El análisis comparativo de concentraciones medidas entre sectores (rural, industrial, residencial y comercial), y entre campañas, se realizó mediante la aplicación de la prueba estadística Mann-Whitney (ausencia de distribución normal), con un valor de significancia  $\alpha = 0.05$ .

Se construyeron mapas de distribución espacial de concentraciones promedio empleando el programa ArcGIS 10.2.1. Los valores de concentraciones se interpolaron sobre el área urbana de Manizales mediante el método IDW (Inverse Distance Weighting). El anterior es un método determinista basado en el principio de la media ponderada por el inverso de la distancia, ampliamente usado en la producción de mapas de calidad del aire (Janssen et al. 2008).

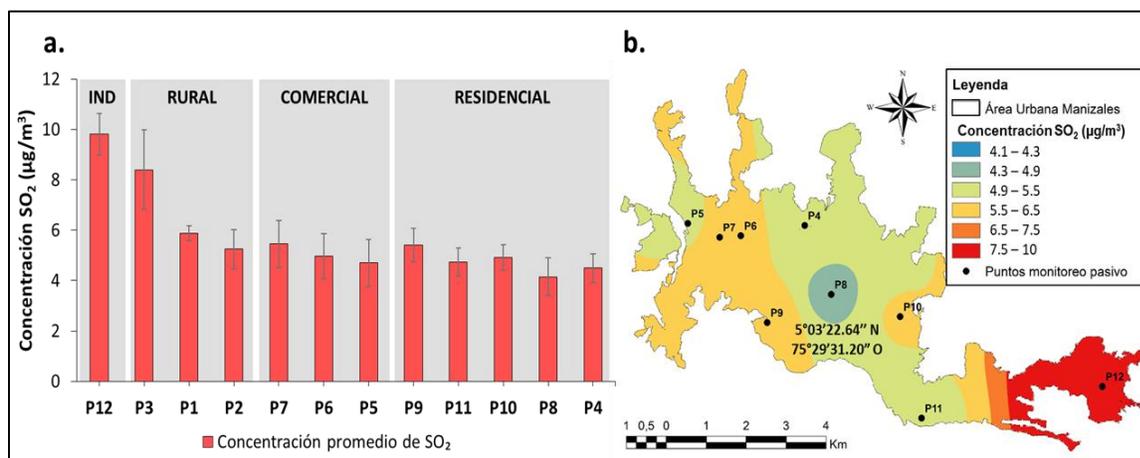
### 3. Resultados y análisis

#### 3.1. Variación espacial de concentraciones

##### Dióxido de azufre

La concentración promedio de  $\text{SO}_2$  en el área urbana de Manizales, fue significativamente inferior a la concentración promedio del área rural ( $5.26 \mu\text{g}/\text{m}^3$  vs.  $6.51 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ,  $U = 204.5$ ,  $p$ -valor = 0.046).

Sin embargo, al analizar individualmente cada punto de monitoreo, la mayor concentración promedio de  $\text{SO}_2$  se registró en P12 ( $9.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) ubicado en el sector industrial (**Fig. 3**). Las instalaciones industriales del sector realizan principalmente actividades de metalurgia, curtiembre, y procesamiento de alimentos y bebidas, que involucran combustión de carbón, combustóleo y diésel. Las elevadas concentraciones de  $\text{SO}_2$  en este sector coinciden con el inventario de emisiones de fuentes antropogénicas de Manizales realizado por González et al. (2017), donde se encontró que más del 80 % de las emisiones locales de  $\text{SO}_x$  provienen del sector industrial ( $113.5 \text{ t/año}$  – año base 2014).



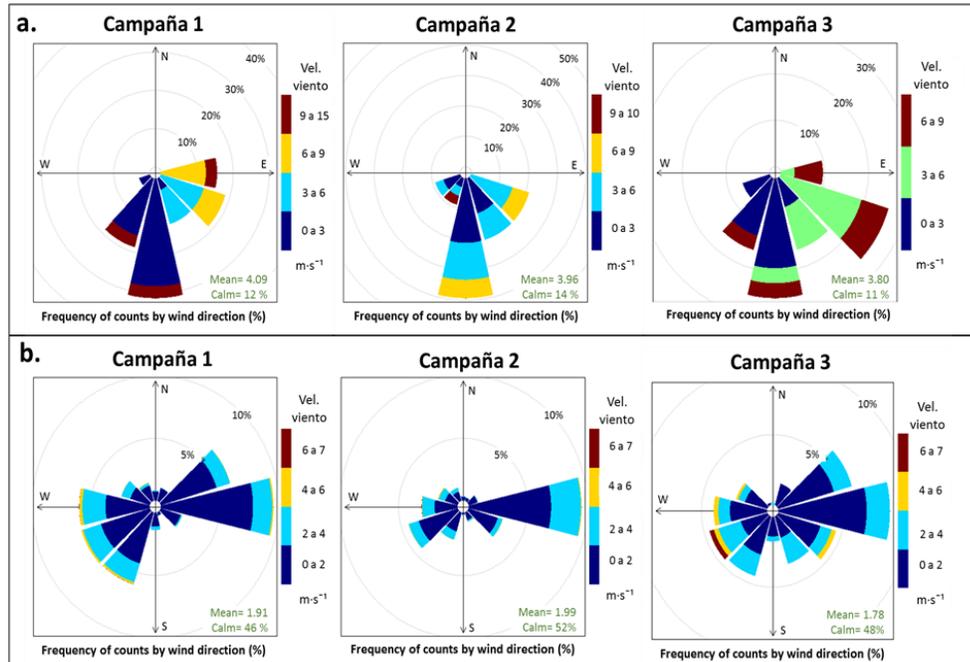
**Figura 3. Concentraciones promedio de  $\text{SO}_2$ . a. Distribución entre sectores, b. Distribución espacial. P = punto de monitoreo pasivo.**

La **figura 3a** presenta la distribución de concentraciones promedio de  $\text{SO}_2$  para los sectores industrial, comercial, residencial y el área rural (mín.:  $4.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , máx.:  $9.81 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , promedio:  $5.7 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). En la **figura 3b** se muestra la distribución espacial de las concentraciones en el área urbana, obtenido por interpolación mediante distancia inversa ponderada (IDW, por sus siglas en inglés).

Concentraciones similares a aquellas del sector industrial, se midieron en el área rural con valores promedio de  $8.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (P3),  $5.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (P1) y  $5.3 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (P2). La zona rural donde se llevó a cabo el muestreo se encontraba predominantemente cubierta por vegetación de páramo y bosques de pino. Allí el flujo vehicular y los asentamientos humanos eran mínimos, por lo cual las concentraciones de  $\text{SO}_2$  encontradas se atribuyen a las emisiones volcánicas del Ruíz, ubicado a una distancia de 9 km de P1, 11 km de P3 y 17 km de P2.

Los patrones de vientos predominantes a nivel regional determinan la orientación de la pluma volcánica. La **figura 4** presenta las rosas de vientos de cada campaña de monitoreo, obtenidas a partir de datos de la estación meteorológica Olleta, ubicada al oeste del cráter activo del volcán (**Fig. 1**). Se observa que el viento se desplazó predominantemente desde el sureste, este y sur, favoreciendo

la dispersión de la pluma volcánica en dirección noroeste (localización de Manizales y punto de monitoreo P2), oeste (P1) y norte (P3).



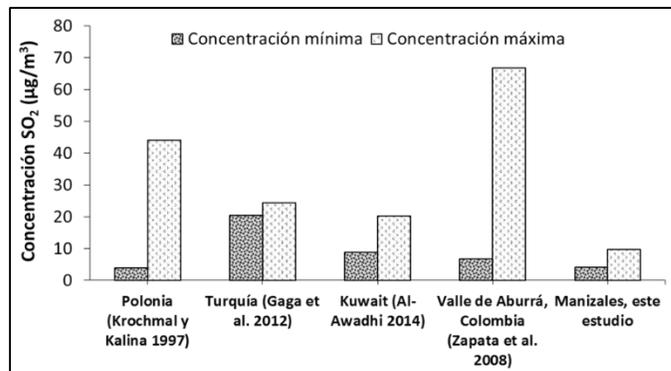
**Figura 4. Rosas de vientos campañas de monitoreo pasivo. a. Zona rural. Campaña 1 dirección predominante desde sur y sureste. Campaña 2 dirección predominante desde el sur. Campaña 3 dirección predominante desde el sur y sur este. b. Zona urbana. Campaña 1 dirección predominante desde este, oeste y suroeste. Campaña 2 dirección predominante desde este. Campaña 3 dirección predominante desde este, noreste y sureste.**

En el área urbana, las concentraciones medidas en el sector industrial ( $9.81 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) fueron superiores a las concentraciones medidas en el sector comercial ( $5.04 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ,  $U = 21$ ,  $p\text{-valor} = 0.022$ ) y residencial ( $4.75 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ,  $U = 31$ ,  $p\text{-valor} = 0.016$ ). Sin embargo, a pesar de presentar concentraciones promedio distintas, no se encontró una diferencia estadísticamente significativa entre las concentraciones del sector comercial y residencial ( $5.04 \mu\text{g}/\text{m}^3$  vs.  $4.75 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ,  $U = 119$ ,  $p\text{-valor} = 0.254$ ).

Las concentraciones promedio medidas en Manizales, no sobrepasaron los niveles máximos para  $\text{SO}_2$  establecidos en las Guías de Calidad del Aire de la OMS ( $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$  para 24 h,  $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$  para 10 min). Sin embargo, se debe tener en cuenta que los límites de la OMS no pueden compararse directamente con este estudio, debido a los diferentes tiempos de muestreo y métodos de medición.

Se compararon las concentraciones de  $\text{SO}_2$  de Manizales con mediciones reportadas por otros estudios de monitoreo pasivo. En la **figura 5** se muestran los valores máximos y mínimos de concentraciones promedio del área urbana de Manizales, y mediciones realizadas en áreas urbanas de otras ciudades del mundo. Los estudios de Krochmal y Kalina (1997) y Gaga et al. (2012), realizados en Polonia (mínimo:  $4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , máximo:  $44 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) y Turquía (mínimo:  $20.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , máximo:  $24.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), respectivamente, asociaron las mayores concentraciones de  $\text{SO}_2$  con emisiones de sectores densamente poblados, donde los habitantes usaban carbón para la calefacción de sus hogares. En el estudio de Al-Awadhi (2014) realizado en Ciudad de Kuwait entre 2011 y 2012, las mayores concentraciones de  $\text{SO}_2$  (mínimo:  $8.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , máximo:  $20.2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) se asociaron con la actividad industrial local. Una asociación similar encontró Zapata et al. (2008) en el Valle de

Aburrá, Colombia. En dicho estudio, los mayores niveles de  $\text{SO}_2$  (mínimo:  $6.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , máximo:  $66.7 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) se detectaron cerca de una zona industrial. En contraste, las concentraciones promedio de  $\text{SO}_2$  encontradas en el área urbana de Manizales (mínimo:  $4.1$ , máximo:  $9.8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), se encontraron por debajo de los estudios mencionados, lo cual puede relacionarse con el número de habitantes de la ciudad, un menor nivel de industrialización, y la inexistencia de estaciones climáticas en Colombia, que hace innecesario el uso de sistemas de calefacción residenciales. La concentración promedio registrada en el área urbana de Manizales ( $5.26 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), fue inferior a concentraciones promedio anuales registradas en ciudades con influencia de emisiones volcánicas como Ciudad de México ( $16 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), influenciada por el volcán Popocatepetl, y Quetzaltenango en Guatemala ( $78.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), influenciada por el volcán Santiaguito (DMA 2016, INSIVUMEH 2015).

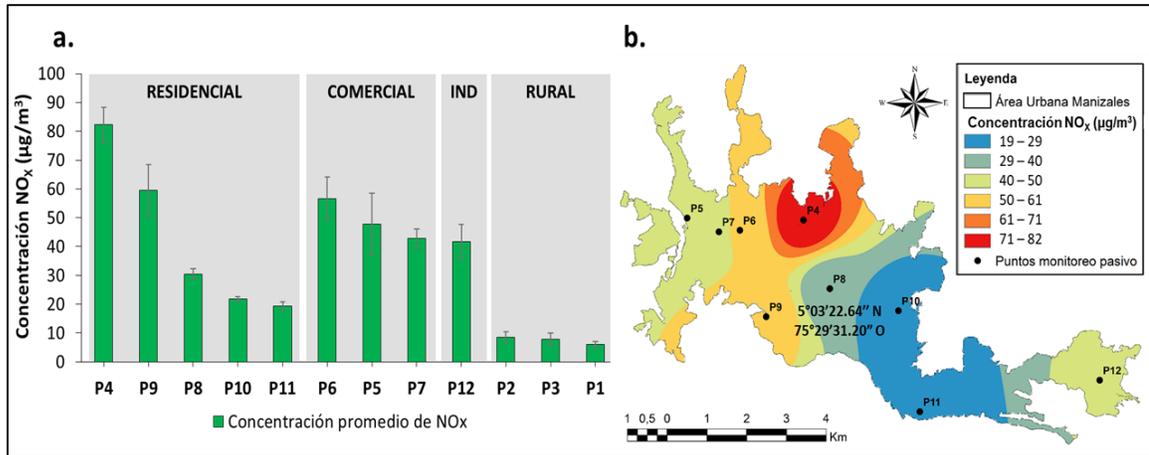


**Figura 5. Comparación concentraciones de  $\text{SO}_2$  medidas por monitoreo pasivo en áreas urbanas del mundo**

El Sistema de Vigilancia de Calidad del Aire de Manizales mide automáticamente concentraciones de  $\text{SO}_2$  y  $\text{O}_3$ . El punto de monitoreo pasivo P7 se ubicó en el mismo lugar donde opera la estación automática en el centro de la ciudad. Durante la campaña 1 (29 de enero a 27 de febrero de 2015), la concentración promedio de  $\text{SO}_2$  medida por monitoreo automático fue de  $2.31 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ( $\pm 1.26 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), mientras que el muestreador pasivo en P7 midió  $4.05 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . La diferencia entre ambas técnicas representa un bias relativo del 76 % (tomando como concentración de referencia la medida por monitoreo automático). Aunque múltiples estudios registran bias  $< 25$  % como aceptables al comparar mediciones por métodos pasivos y activos (Ferm y Svanberg 1998, Cruz et al. 2004, He et al. 2014), el bias del 76 % calculado en P7 se asocia con la variabilidad de concentraciones de  $\text{SO}_2$  registradas por el analizador automático a lo largo del día, representada en picos de concentración producto de la dinámica de fuentes de emisión locales, así como la influencia del transporte y dilución por los patrones de viento y la evolución de la capa de mezcla. Durante la campaña 1, el rango de concentraciones medidas de forma automática en P7 varió entre  $0.026$  y  $24.33 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , con valores máximos ( $> 15 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) registrados del 04 al 06 de febrero de 2015. No se compararon las concentraciones por ambas técnicas para las campañas 2 y 3, ya que el analizador automático estuvo fuera de operación.

### Óxidos de Nitrógeno

La concentración promedio de  $\text{NO}_x$  en los puntos del área urbana ( $43.30 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) fue significativamente superior ( $U = 21$ ,  $p$ -valor =  $1.5 \cdot 10^{-9}$ ) a la concentración promedio del área rural ( $7.45 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). La **figura 6a** presenta la variación en las concentraciones promedio de  $\text{NO}_x$  en los sectores industrial, comercial, residencial y el área rural (mín.:  $5.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , máx.:  $82.2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , promedio:  $35.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). En la **figura 6b** se muestra la distribución espacial de las concentraciones de  $\text{NO}_x$  en el área urbana (interpolación IDW).



**Figura 6. Concentraciones promedio de NO<sub>x</sub>. a. Distribución entre sectores, b. Distribución espacial. P = punto de monitoreo pasivo.**

Al evaluar individualmente los niveles de NO<sub>x</sub> medidos en los puntos de monitoreo, se encontraron las mayores concentraciones de NO<sub>x</sub> en los puntos cercanos a importantes corredores viales de Manizales con alto flujo vehicular. Particularmente, en P4 y P9, ambos de la zona residencial, se midieron las mayores concentraciones de NO<sub>x</sub> de la red de monitoreo (82.2 µg/m<sup>3</sup> y 59.1 µg/m<sup>3</sup>, respectivamente). P4 se ubicó en un sector residencial al norte de Manizales, cercano a un importante corredor vial (Avenida Kévin Ángel), mientras que P9 se ubicó en la zona residencial sureste donde se ubica la Terminal de Transportes de Manizales. Las mayores concentraciones de NO<sub>x</sub> registradas en P4 y P9 se explican en que la principal fuente de estos contaminantes son los vehículos en ruta. Los corredores viales cercanos a P4 y P9 hacen parte de las vías más importantes de la ciudad, con una alta circulación de vehículos particulares, de transporte público y de carga. De acuerdo con el inventario de emisiones de fuentes antropogénicas para Manizales (año base 2014), los vehículos en ruta representan el 98 % de las emisiones totales de NO<sub>x</sub>, con una contribución de 4890 t/año (González et al. 2017).

La concentración promedio de NO<sub>x</sub> de sectores residenciales (39.8 µg/m<sup>3</sup>), superó la concentración promedio del sector comercial (49.1 µg/m<sup>3</sup>), aunque esta observación no fue estadísticamente significativa (U = 111, p-valor = 0.157). Valores similares se midieron entre el sector industrial (41.7 µg/m<sup>3</sup>) y el sector comercial (49.1 µg/m<sup>3</sup>), los cuales no presentaron una diferencia significativa (U = 96, p-valor = 0.24). En toda la red de monitoreo, las menores concentraciones promedio de NO<sub>x</sub> se registraron en el área rural (7.45 µg/m<sup>3</sup>).

Las concentraciones promedio de NO<sub>x</sub> en P4 (residencial, 82.2 µg/m<sup>3</sup>), P9 (residencial, 59.4 µg/m<sup>3</sup>), P6 (comercial, 56.7 µg/m<sup>3</sup>), P5 (comercial, 47.8 µg/m<sup>3</sup>), P7 (comercial, 42.8 µg/m<sup>3</sup>), y P12 (industrial, 41.7 µg/m<sup>3</sup>), superaron el valor guía de calidad del aire anual para NO<sub>2</sub> de la OMS (40 µg/m<sup>3</sup>). Sin embargo, se debe tener en cuenta que los límites de la OMS no pueden compararse directamente con este estudio, debido a la diferencia de tiempos de muestreo y métodos de medición.

Se compararon las concentraciones de NO<sub>x</sub> medidas en el área urbana de Manizales con las concentraciones reportadas de NO<sub>2</sub> y NO<sub>x</sub> en estudios de otras ciudades donde se usaron muestreadores pasivos. En la **figura 7** se observa que el rango de concentraciones promedio de NO<sub>x</sub> en el área urbana de Manizales (mínimo: 41.7 µg/m<sup>3</sup>, máximo: 82.2 µg/m<sup>3</sup>) es elevado, en contraste con otras ciudades de Polonia (mínimo: 8 µg/m<sup>3</sup>, máximo: 32 µg/m<sup>3</sup>) (Krochmal y Kalina 1997), Turquía (mínimo: 7.6 µg/m<sup>3</sup>, máximo: 11.4 µg/m<sup>3</sup>) (Gaga et al. 2012), Costa Rica (mínimo: 17 µg/m<sup>3</sup>, máximo: 59 µg/m<sup>3</sup>) (Herrera et al. 2014), y Colombia (mínimo: 19 µg/m<sup>3</sup>, máximo: 60.7

$\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) (Zapata et al. 2008). Este contraste podría originarse en que en las ciudades mencionadas sólo se consideró el  $\text{NO}_2$ . En sus mediciones en Ciudad de Kuwait, Al-Awadhi et al. (2014) encontró niveles de  $\text{NO}_x$  entre 46.8 y  $98.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , semejantes a los niveles encontrados en Manizales.

El Sistema de Calidad del Aire de Manizales no cuenta con analizadores automáticos de  $\text{NO}_x$ , por lo que no se compararon las concentraciones de monitoreo pasivo con mediciones automáticas.

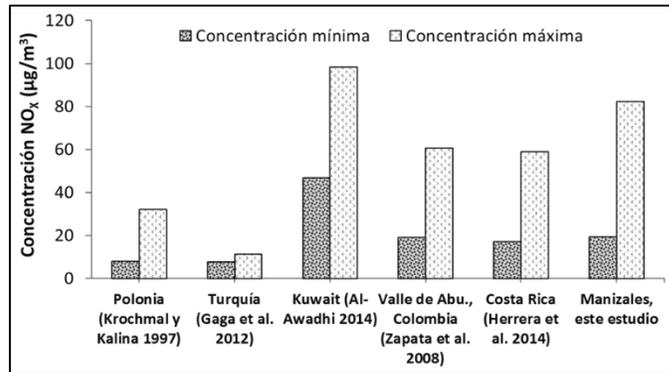


Figura 7. Comparación concentraciones de  $\text{NO}_x$  medidas por monitoreo pasivo en áreas urbanas del mundo

## Ozono

La concentración promedio de  $\text{O}_3$  en el área rural ( $56.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), fue significativamente superior ( $U = 37$ ,  $p\text{-valor} = 7.4 \cdot 10^{-5}$ ) a la concentración promedio del área urbana ( $34.2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). La figura 8a presenta las concentraciones promedio de  $\text{O}_3$  para los sectores industrial, comercial, residencial y el área rural (mín.:  $16.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , máx.:  $68.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , promedio:  $39.5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). La figura 8b presenta la distribución espacial de las concentraciones de  $\text{O}_3$  en el área urbana de Manizales (interpolación IDW).

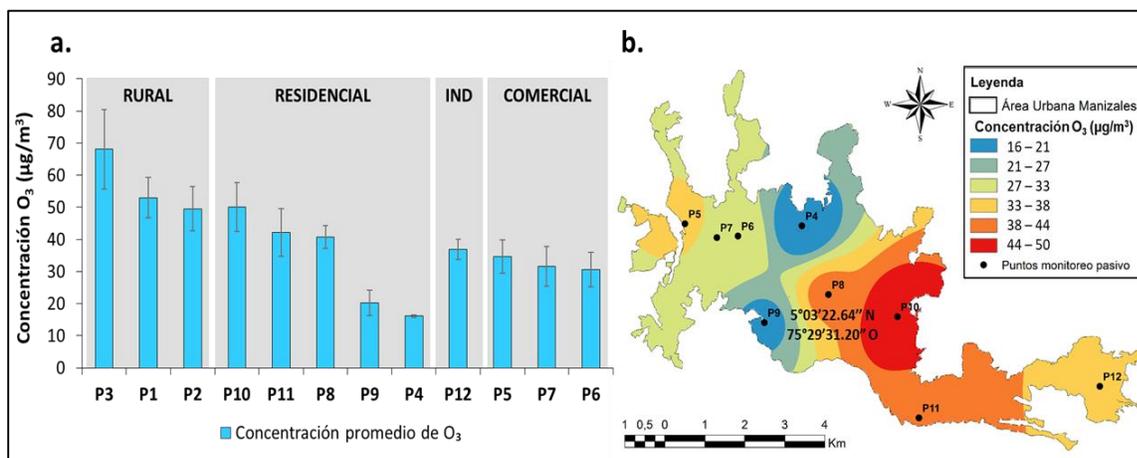
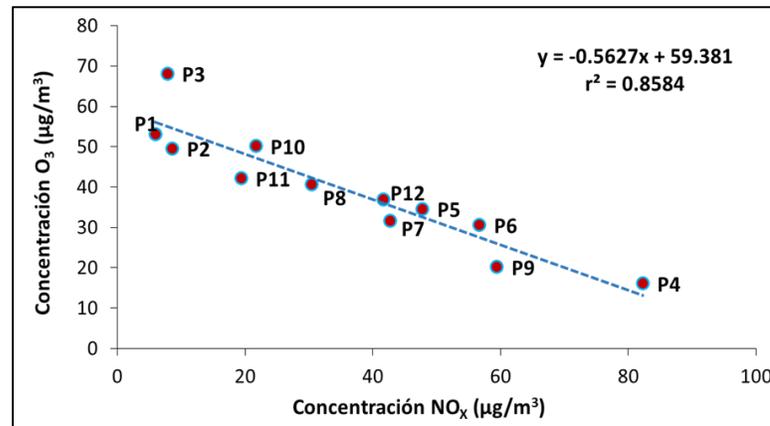


Figura 8. Concentraciones promedio de  $\text{O}_3$ . a. Distribución entre sectores, b. Distribución espacial. P = punto de monitoreo pasivo

Una concentración promedio de  $\text{O}_3$  similar a las concentraciones encontradas en el área rural se midió en P10 ( $50.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), localizado en una zona residencial de bajo flujo vehicular, importante vegetación y menor urbanización, en relación con los puntos residenciales P4, P8, P9 y P11, cercanos

a importantes corredores viales, donde se encontraron elevadas concentraciones de  $\text{NO}_x$ . La concentración promedio de  $\text{O}_3$  en los puntos residenciales ( $35.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), no fue significativamente superior ( $U:9$ ,  $p$ -valor = 0.31) a la concentración promedio del sector comercial ( $32.3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). De forma similar se comportaron las concentraciones promedio del sector residencial ( $35.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) e industrial ( $36.89 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), que no fueron significativamente diferentes entre sí ( $U:11$ ,  $p$ -valor = 0.44). La menor concentración de  $\text{O}_3$  se registró en P4 ( $16.1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), un punto altamente influenciado por emisiones vehiculares, donde se midió la mayor concentración promedio de  $\text{NO}_x$  ( $82.2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ).

Las concentraciones de  $\text{O}_3$  medidas en la red de monitoreo, presentaron una tendencia inversa en relación con las concentraciones medidas de  $\text{NO}_x$ : mayores niveles de  $\text{O}_3$  en el área rural ( $56.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) que en el área urbana ( $34.2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), versus mayores niveles de  $\text{NO}_x$  en el área urbana ( $43.3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) que en el área rural ( $7.45 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). En la **figura 9** se muestra la correlación lineal inversa obtenida a partir de las concentraciones promedio de ambos gases en la red de monitoreo, con un valor de  $r^2 = 0.858$ . Esta tendencia se ha identificado en varios estudios donde las zonas mayormente pobladas cuentan con niveles inferiores de  $\text{O}_3$  en comparación con sectores periféricos (Salem et al. 2009, Gaga et al. 2012, Yoo et al. 2015). La relación inversa ocurre por dos factores principales: (i) la fotoquímica del ozono, y (ii) la facilidad de transporte del ozono desde donde se origina hacia ubicaciones remotas (Seinfeld y Pandis 2006).



**Figura 9. Relación entre concentraciones promedio de  $\text{NO}_x$  y  $\text{O}_3$**

Al analizar la distribución espacial de las concentraciones de  $\text{O}_3$  en función de su mecanismo de formación, es posible inferir que en la zona rural prevalece una relación  $\text{COVs}/\text{NO}_x$  alta, es decir, las concentraciones de los  $\text{COVs}$  son mayores que las concentraciones de  $\text{NO}_x$ . Lo anterior es coherente con las bajas concentraciones de  $\text{NO}_x$  que se midieron en los puntos del área rural. Además, es importante considerar que las fuentes biogénicas son grandes contribuyentes en emisiones de  $\text{COVs}$ , precursores de ozono (EPA 2016). Este tipo de fuentes se encontraron abundantemente en el área rural estudiada. Bajo una relación  $\text{COVs}/\text{NO}_x$  alta, se favorece la formación de  $\text{O}_3$  por la interacción  $\text{OH-COV}$ .

Las concentraciones promedio de  $\text{O}_3$  medidas en cada punto de la red de monitoreo, no superaron los valores guía de la OMS ( $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$  para 8 h). Sin embargo, se debe tener en cuenta que los límites de la OMS para  $\text{O}_3$  no pueden compararse de forma directa, debido a la diferencia de los tiempos de muestreo y métodos de medición.

La concentración de  $\text{O}_3$  medida en P7 también se comparó con la concentración promedio medida por monitoreo automático. De acuerdo a la disponibilidad de datos, fue posible realizar la comparación con mediciones de la campaña 1 (29 de enero al 27 de febrero de 2015). La

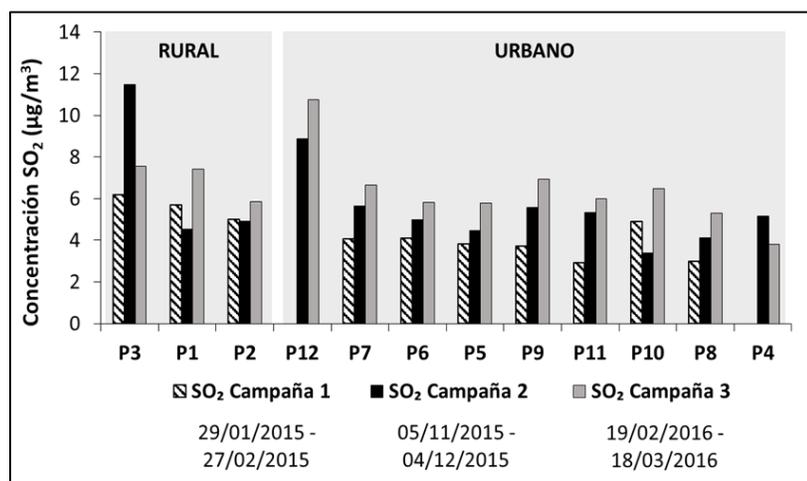
concentración promedio de  $O_3$  medida de forma automática fue  $28.4 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ( $\pm 11.6 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), mientras que la concentración medida por monitoreo pasivo fue  $21.7 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . La diferencia entre ambas técnicas representa un bias relativo del 24 %, aceptable según varios estudios donde se comparan técnicas automáticas y pasivas (Ferm y Svanberg 1998, Cruz et al. 2004, He et al. 2014). Las concentraciones de  $O_3$  medidas por monitoreo automático durante la campaña 1, variaron a lo largo del día entre  $0.006$  y  $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

### 3.2. Variación temporal de concentraciones

#### Dióxido de azufre

En el área rural, la concentración promedio de  $SO_2$  de la campaña 2 ( $7.0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) fue superior a la concentración promedio de la campaña 1 ( $5.6 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), sin embargo la diferencia entre ambas no fue estadísticamente significativa (U:12, p-valor = 0.61). De igual forma, en el área rural la concentración promedio de la campaña 2 ( $7.0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), no fue significativamente superior (U:11, p-valor = 0.98) a la concentración promedio de la campaña 3 ( $6.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). Según el Servicio Geológico Colombiano (SGC 2015), las emisiones promedio de  $SO_2$  del volcán Nevado del Ruíz pasaron de  $1252$  t/día en la campaña 1, a  $1293$  t/día en la campaña 2, y  $1433$  t/día en la campaña 3 (**Cuadro III**). La variación de emisiones volcánicas promedio entre campañas representa un comportamiento muy estable, considerando que en los últimos años el Nevado del Ruíz ha alcanzado emisiones de hasta  $32\,000$  t/día de  $SO_2$  (SGC 2015). Lo anterior explicaría la poca variabilidad entre concentraciones de  $SO_2$  medidas entre campañas.

La variación de concentraciones entre los puntos del área rural P1, P2 y P3 (**Fig. 10**), muestra que durante las campañas 1 y 2 mayores concentraciones de  $SO_2$  se midieron en P3. La variabilidad entre las concentraciones del área rural se asocia con la dirección predominante del viento, que determina la orientación de la pluma volcánica. Como se muestra en la **figura 4**, durante las campañas 1 y 2 el viento se desplazó predominantemente desde el sur hacia el norte del cráter, lo que pudo favorecer las mayores concentraciones de  $SO_2$  en P3. Durante la campaña 3, el viento se desplazó predominantemente hacia el norte y noroeste, promoviendo la dispersión de la emisión volcánica en dirección a los puntos P3 y P2, favoreciendo los niveles de  $SO_2$  encontrados. La dirección de la dispersión de la pluma volcánica durante la campaña 3 pudo favorecer también las concentraciones medidas en Manizales, localizada al noroeste del volcán (**Fig. 1**).



**Figura 10.** Variación temporal de concentraciones de  $SO_2$ . P = punto de monitoreo pasivo.

En el área urbana (P4 a P12), la concentración promedio de SO<sub>2</sub> en la campaña 2 (5.3 µg/m<sup>3</sup>), fue significativamente superior (U = 35; p-valor = 0.005) a la concentración promedio de la campaña 1 (3.8 µg/m<sup>3</sup>). La concentración promedio de la campaña 3 (6.4 µg/m<sup>3</sup>) fue significativamente superior (U = 63; p-valor = 0.026) a la concentración promedio de la campaña 2 (5.3 µg/m<sup>3</sup>). Las principales fuentes de SO<sub>2</sub> en la ciudad son los vehículos en ruta e instalaciones industriales, cuyo comportamiento no exhibe una variabilidad significativa a lo largo del año, por lo que la variación temporal de SO<sub>2</sub> se asoció con las condiciones meteorológicas y la actividad del volcán Nevado del Ruíz.

Entre las campañas de monitoreo, la precipitación varió de acuerdo a la bimodalidad climática regional (**Cuadro III**). En el caso del área urbana, menores niveles de precipitación y humedad relativa, y mayores temperaturas, se registraron durante la campaña 1 (92 mm, 91 %, 18 °C) y la campaña 3 (107 mm, 89 %, 18 °C). En contraste, durante la campaña 2 se registraron mayores niveles de precipitación y humedad relativa, y menores temperaturas (169 mm, 97 %, 16 °C). Se esperaba que durante la campaña 2 la precipitación y la humedad relativa promovieran una disminución en las concentraciones de SO<sub>2</sub>, por la tendencia del contaminante a reaccionar con el agua y el lavado atmosférico; sin embargo, este comportamiento no se observó en este estudio. Algunos estudios donde se analiza la relación entre variables meteorológicas y concentraciones de SO<sub>2</sub>, reportaron bajas correlaciones entre la precipitación y las concentraciones del contaminante (Turalioglu et al. (2005), r<sup>2</sup> = -0.137 y Özbay (2012) r<sup>2</sup> = -0.264). Por contar con un limitado número de mediciones, no se calcularon coeficientes de correlación en este estudio. Los resultados sugieren que las concentraciones de SO<sub>2</sub> medidas en el área urbana pudieron no estar controladas por la meteorología, pero influenciadas por la emisión del Nevado del Ruíz. De acuerdo a las rosas de vientos del área urbana (**Fig. 4**), es notable que durante las campañas 2 y 3, el viento se desplazó predominantemente desde el este y sureste, donde se ubica el volcán y la zona industrial al sureste de Manizales.

### Óxidos de Nitrógeno

En el área urbana la concentración promedio de NO<sub>x</sub> de la campaña 2 (53.5 µg/m<sup>3</sup>), fue significativamente superior (U = 78; p-valor = 0.037) a la concentración promedio de la campaña 1 (33.9 µg/m<sup>3</sup>) (**Fig. 11**). La concentración promedio en la campaña 3 (40.3 µg/m<sup>3</sup>) fue inferior a la concentración de la campaña 2 (53.5 µg/m<sup>3</sup>), aunque la diferencia entre ambas no fue significativa (U:24, p-valor = 0.104).

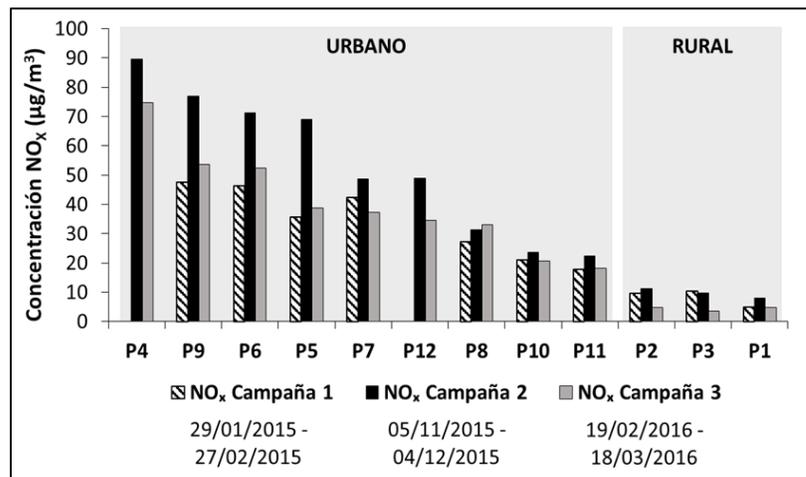


Figura 11. Variación temporal de concentraciones de NO<sub>x</sub>. P = punto de monitoreo pasivo.

La variación temporal de  $\text{NO}_x$  se analizó en función de las condiciones meteorológicas, ya que se desconoce un patrón significativo de variación temporal en los flujos vehiculares. Estudios han sugerido que mayores concentraciones de  $\text{NO}_x$  tienen lugar en días húmedos y con bajos niveles de temperatura y radiación solar, ya que se desfavorecen las reacciones fotoquímicas (Kalbarczyk y Kalbarczyk 2007, Ocak y Turalioglu 2008). Durante la campaña 2 (mayores concentraciones de  $\text{NO}_x$ ), las condiciones meteorológicas promedio (humedad 96 %, precipitación total acumulada 169 mm, temperatura 16 °C y radiación solar 347  $\text{W}/\text{m}^2$ ), típicas de un periodo lluvioso en la región, habrían favorecido los mayores niveles de  $\text{NO}_x$  encontrados (53.5  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ). Las condiciones cálidas de la campaña 1 (humedad 91 %, precipitación total acumulada 92 mm, temperatura 18 °C y radiación solar 375  $\text{W}/\text{m}^2$ ), y la campaña 3 (humedad 89 %, precipitación total acumulada 107 mm, temperatura 18 °C y radiación solar 364  $\text{W}/\text{m}^2$ ), sugieren la transformación fotoquímica de los  $\text{NO}_x$ , como se evidencia en las mediciones de  $\text{O}_3$ , cuyas mayores concentraciones se registraron en la campaña 3.

### Ozono

Tanto en el área rural como en el área urbana, se midieron mayores concentraciones de  $\text{O}_3$  durante la campaña 3 (Fig. 12). En el área rural, la concentración promedio de la campaña 3 (73  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ), fue significativamente superior a la concentración promedio de la campaña 1 (44.8  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , U:70, p-valor = 0.017), ambas campañas desarrolladas durante periodos secos. Sin embargo, la concentración promedio de la campaña 3 no fue significativamente superior a la concentración promedio de la campaña 2 (52.9  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , U:12, p-valor = 0.073 - periodo lluvioso).

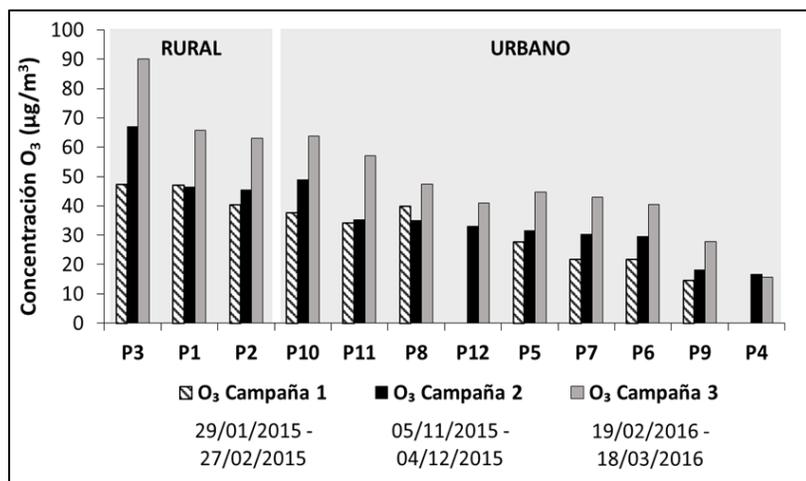


Figura 12. Variación temporal de concentraciones de  $\text{O}_3$ . P = punto de monitoreo pasivo.

La variación de las concentraciones entre campañas de monitoreo podría asociarse con la influencia ejercida por la radiación solar y la disponibilidad de  $\text{NO}_x$ . En el caso de la campaña 3, la radiación solar registrada en el área rural (116  $\text{W}/\text{m}^2$ ), fue más alta que la radiación de las campañas 1 (100  $\text{W}/\text{m}^2$ ) y 2 (90  $\text{W}/\text{m}^2$ ). Además, en la campaña 3 se midió la menor concentración promedio de  $\text{NO}_x$  en el área rural (4.4  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ), lo que podría significar el consumo de estos precursores para formar ozono.

En el área urbana, la concentración promedio de  $\text{O}_3$  de la campaña 3 (49.9  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ), fue significativamente superior que las concentraciones promedio de la campaña 1 (33.2  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , U:57, p-valor = 0.020), y la campaña 2 (36.4  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , U:66, p-valor = 0.032). Se esperaría que en el área urbana las condiciones meteorológicas y los niveles de  $\text{NO}_x$  también explicasen la variación

temporal de ozono. Sin embargo, la radiación solar promedio de la campaña 3 en el área urbana ( $364 \text{ W/m}^2$ ), fue ligeramente inferior a la radiación promedio de la campaña 1 ( $375 \text{ W/m}^2$ ) (**Cuadro III**). Así mismo, en el área urbana se registró una menor concentración promedio de  $\text{NO}_x$  en la campaña 1 ( $33.9 \mu\text{g/m}^3$ ). En contraste con la campaña 2 ( $53.5 \mu\text{g/m}^3$ ) y la campaña 3 ( $40.3 \mu\text{g/m}^3$ ), lo cual no explica desde la fotoquímica los niveles más altos de  $\text{O}_3$  registrados durante la última campaña de monitoreo. Los mayores valores de  $\text{O}_3$  encontrados en el área urbana durante la campaña 3, se asocian con la dirección predominante del viento (**Fig. 4**), que pudo favorecer el desplazamiento de  $\text{O}_3$  desde el área rural hacia el área urbana.

#### 4. Conclusiones

Los muestreadores pasivos se emplearon para medir concentraciones sobre un amplio dominio geográfico, cubriendo lugares donde podría resultar imposible realizar otro tipo de monitoreo por dificultades de acceso, ausencia de energía eléctrica, entre otros factores. El diseño de la red de monitoreo permitió inferir la posible influencia de fuentes de emisiones antropogénicas y naturales, y la variación de concentraciones entre sectores residenciales, comerciales, industriales y rurales.

Las concentraciones de  $\text{SO}_2$  fueron significativamente superiores en el sector industrial y el área rural (influenciada por emisiones volcánicas), en comparación con los sectores residencial y comercial. Las más bajas concentraciones de  $\text{SO}_2$  se midieron en sectores residenciales. Los niveles medidos de  $\text{SO}_2$  no superaron los límites establecidos por la OMS y fueron inferiores a las mediciones realizadas en otras ciudades donde se emplearon muestreadores pasivos y donde existe influencia de emisiones volcánicas. Las mayores concentraciones de  $\text{NO}_x$  se midieron en sectores residenciales, cercanos a concurridos corredores viales. En varios puntos de monitoreo, las concentraciones de  $\text{NO}_x$  superaron los niveles recomendados por la OMS y fueron elevadas al compararse con otros estudios de monitoreo pasivo. Estos hallazgos sugieren la necesidad de implementar acciones respecto al monitoreo continuo de  $\text{NO}_x$  y la reducción en niveles de exposición, principalmente en los sectores residenciales, considerando además que en Manizales la población aumenta anualmente a una tasa del 0.4 %, en contraste con la motorización que aumenta a una tasa del 8 % anual (Agencia de Noticias UN 2017). Las menores concentraciones de  $\text{NO}_x$  se midieron en el área rural debido a la poca intervención antropogénica. En el caso del  $\text{O}_3$ , las concentraciones del área rural fueron significativamente superiores a las concentraciones del área urbana. Este hecho se asocia con la mayor disponibilidad de precursores como los COVs, que favorecen la fotoquímica para la formación de  $\text{O}_3$ . Menores concentraciones de  $\text{O}_3$  se midieron en puntos residenciales y comerciales cercanos a corredores viales de alta afluencia vehicular, y donde se midieron los mayores niveles de  $\text{NO}_x$ . Se evidenció una correlación inversa ( $r^2 = 0.858$ ) entre las concentraciones medidas de  $\text{O}_3$  y  $\text{NO}_x$  en los puntos de la red de monitoreo.

La variación temporal de concentraciones de  $\text{SO}_2$  demostró una mayor influencia de las emisiones volcánicas y los patrones de viento, que determinaron mayores concentraciones del contaminante durante la campaña 3 (febrero a marzo de 2016). Este hecho también explicaría que las menores concentraciones de  $\text{SO}_2$  no se midiesen en la campaña 2, durante la cual se registraron mayores niveles de precipitación, de lo que se esperaría una reducción en los niveles del contaminante. La variación temporal de  $\text{NO}_x$  se asoció con las condiciones meteorológicas. Durante la campaña 2 (lluviosa), las concentraciones de  $\text{NO}_x$  fueron significativamente superiores a las mediciones de las campañas 1 y 3 (cálidas). Durante la campaña 2 se registraron menores niveles de radiación solar y mayor humedad relativa, condiciones que desfavorecen la transformación fotoquímica de  $\text{NO}_x$ . Las concentraciones de  $\text{O}_3$  fueron significativamente superiores durante la campaña 3 (cálida) sin embargo, en esta campaña no se registraron los mayores niveles de radiación solar. Esto sugiere que la variación temporal de  $\text{O}_3$  estuvo influenciada por los patrones de viento, que habrían promovido el desplazamiento de  $\text{O}_3$  desde áreas remotas como el área rural, con mayores concentraciones del contaminante.

## Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales y a la autoridad ambiental regional CORPOCALDAS, por el apoyo a través del proyecto “Convenio Interadministrativo de Asociación 130-2014”. Los autores también agradecen al Programa Jóvenes Investigadores e Innovadores Convocatoria 617 de 2013 y Convocatoria 706 de 2015 del Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación (COLCIENCIAS). La profesora Beatriz Aristizábal coordinó parte de este trabajo durante la realización de su año sabático concedido por la Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales. También se dan agradecimientos especiales a las entidades que contribuyeron a la ejecución de las campañas de monitoreo pasivo: Grupo de Trabajo Académico en Ingeniería Hidráulica y Ambiental, Observatorio Vulcanológico y Sismológico de Manizales, Gobernación de Caldas, Aguas de Manizales S.A. E.S.P., Sociedad Colombiana de Arquitectos, Hostal La Laguna, Policía Nacional de Colombia, así como a los ciudadanos que contribuyeron en este estudio.

## Referencias

- Agencia de Noticias UN (2017). Movilidad, transporte público y calidad de vida. Agencia de Noticias Universidad Nacional [en línea]. <http://agenciadenoticias.unal.edu.co/en/detalle/article/en-manizales-aumenta-mas-la-cifra-de-vehiculos-que-la-de-habitantes.html> 09/03/2017.
- Al-Awadhi J.M. (2014). Measurement of air pollution in Kuwait city using passive samplers. *ACS* 4, 253-271. DOI: 10.4236/acs.2014.42028
- Brown R., Charlton J. y Saunders K. (1981). The development of an improved diffusive sampler. *Am. Ind. Hyg. Assoc. J.* 42 (12), 865-869. DOI: 10.1080/15298668191420828
- CONPES (2008). Documento Conpes 3550: Lineamientos para la formulación de la política integral de salud ambiental con énfasis en los componentes de calidad de aire, Calidad de Agua y Seguridad Química. Consejo Nacional de Política Económica y Social. Bogotá, D. C., Colombia, 54 pp.
- Cortés A.C. (2010). Análisis de la variabilidad espacial de la precipitación en una ciudad de media montaña andina. Caso de estudio: Manizales. Tesis de Maestría. Facultad de Ingeniería y Arquitectura. Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales. Manizales, Colombia, 108 pp.
- Cruz L., Campos V., Silva A. y Tavares T. (2004). A field evaluation of a SO<sub>2</sub> passive sampler in tropical industrial and urban air. *Atmos. Environ.* 38 (37), 6425-6429. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2004.07.022
- DMA (2016). Calidad del aire en la Ciudad de México. Dirección de Monitoreo Atmosférico. Informe. Ciudad de México, México, 179 pp.
- Elminir H.K. (2005). Dependence of urban air pollutants on meteorology. *Sci. Total Environ.* 350 (1-3), 225-237. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2005.01.043
- EPA (2016). Volatile organic compounds. Environmental Protection Agency [en línea]. [http://www3.epa.gov/cgi-bin/broker?\\_service=data&\\_debug=0&\\_program=dataprog.national\\_1.sas&polchoice=VOC](http://www3.epa.gov/cgi-bin/broker?_service=data&_debug=0&_program=dataprog.national_1.sas&polchoice=VOC) 08/02/2016.
- Érseková A., Hilscherová K., Klánová J., Giesy J. y Novák J. (2014). Effect-based assessment of passive air samples from four countries in Eastern Europe. *Environ. Monit. Assess.* 186 (6), 3905-3916. DOI: 10.1007/s10661-014-3667-z
- Ferm M. y Svanberg P. (1998). Cost-efficient techniques for urban- and background measurements of SO<sub>2</sub> and NO<sub>2</sub>. *Atmos. Environ.* 32 (8), 1377-1381. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2004.07.022
- Finlayson-Pitts B. J. y Pitts J. N. (2000). Chemistry of the upper and lower atmosphere. Academic Press, San Diego, EUA, 942 pp.
- Gaga E., Döğeroğlu T., Özden O., Ari A., Yay O., Altuğ H., Akyol N., Örnektekin S. y Van Doorn W. (2012). Evaluation of air quality by passive and active sampling in an urban city in Turkey: current status and spatial analysis of air pollution exposure. *Environ. Sci. Pollut. R.* 19 (8), 3579-3596. DOI: 10.1007/s11356-012-0924-y
- Galán D., Fernández R., Díaz E. y Herce M. (2001). Estudio de las concentraciones de ozono superficial en la atmósfera de la comunidad de Madrid usando muestreadores pasivos. *Rev. Salud Ambient.* 1 (1), 20-29.

- González C.M., Gómez C.D., Rojas N.Y., Acevedo H. y Aristizábal B.H. (2017). Relative impact of on-road vehicular and point-source industrial emissions of air pollutants in a medium-sized Andean city. *Atmos. Environ.* 152, 279-289. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2016.12.048
- Halmer M., Schmincke H., y Graf H. (2012). The annual volcanic gas input into the atmosphere, in particular to the stratosphere: a global data set for the past 100 years. *J. Volcanol. Geoth. Res.* 115 (1-3), 511-528. DOI: 10.1016/S0377-0273(01)00318-3
- He J., Xu H., Balasubramanian R., Chan C. y Wang C. (2014). Comparison of NO<sub>2</sub> and SO<sub>2</sub> measurements using different passive samplers in tropical environment. *Aerosol Air Qual. Res.* 14, 355-363. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2004.07.022
- Herrera J., Rodríguez S., Herrera E., Rojas J., Beita V. y Solórzano D. (2014). Uso de muestreadores pasivos para la determinación de dióxido de nitrógeno en dos municipios del área metropolitana de Costa Rica en 2004-2013. *Trop. J. Enviro. Sci.* 48 (2), 20-29. DOI: 10.15359/rca.48-2.2
- INSIVUMEH (2015). Índice de calidad del aire. Instituto Nacional de Sismología, Vulcanología, Meteorología e Hidrología. Informe. Ciudad de Guatemala, Guatemala, 9 pp.
- Janssen S., Dumont G., Fierens F. y Mensink C. (2008). Spatial interpolation of air pollution measurements using CORINE land cover data. *Atmos. Environ.* 42 (20), 4884-4903. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2008.02.043
- Kalbarczyk R. y Kalbarczyk E. (2007). Influence of meteorological conditions on the concentration of NO<sub>2</sub> and NO<sub>x</sub> in northwest Poland in relation to wind direction. *Annals of Warsaw University of Life Sciences - SGGW Land Reclamation* 38, 81-94. DOI: 10.2478/v10060-008-0025-2
- Klimont, Z., Smith, S. J., y Cofala, J. (2013). The last decade of global anthropogenic sulfur dioxide: 2000-2011 emissions. *Environ. Res. Lett.* 8, 1-6. DOI: 10.1088/1748-9326/8/1/014003
- Krochmal D. y Kalina A. (1997). Measurements of nitrogen and sulphur dioxide concentrations in urban and rural areas of Poland using a passive sampling method. *Environ. Pollut.* 96 (3), 401-407. DOI: 10.1016/S0269-7491(97)00038-9
- Manizales Cómo Vamos (2016). Cómo vamos en movilidad [en línea]. <http://manizalescomovamos.org/wp-content/uploads/2016/08/Movilidad.pdf> 06/07/2016.
- Meng Z., Xu X., Wang T., Zhang X., Yu X., Wang S., Lin W., Chen Y., Jiang Y. y An X. (2010). Ambient sulfur dioxide, nitrogen dioxide, and ammonia at ten background and rural sites in China during 2007-2008. *Atm. Env.* 44 (21-22), 2625-2631. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2010.04.008
- MADS (2012). Diagnóstico nacional de salud ambiental. Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible. Informe. Bogotá D. C., Colombia, 368 pp.
- Ocak S. y Turalioglu F. (2008). Effect of meteorology on the atmospheric concentrations of traffic related pollutants in Erzurum, Turkey. *J. Int. Environ. Appl. Sci.* 3 (5), 325-335.
- OMS (2014). Calidad del aire (exterior) y salud. Organización Mundial de la Salud [en línea]. <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs313/es/> 06/07/2015.
- OPS (2005). Evaluación de los efectos de la contaminación del aire en la salud de América Latina y el Caribe. Organización Panamericana de la Salud. Informe. Washington, D.C., EUA, 72 pp.
- Palmes E.D. y Gunnison A.F. (1973). Personal monitoring device for gaseous contaminants. *Am. Ind. Hyg. Assoc. J.* 34 (2), 78-81. DOI: 10.1080/0002889738506810
- Salem A.A., Soliman A. A. y El-Haty I.A. (2009). Determination of nitrogen dioxide, sulfur dioxide, ozone and ammonia in ambient air using passive sampling method associated with ion chromatographic and potentiometric analyses. *Air Qual. Atmos. Health* 2 (3), 133-145. DOI: 10.1007/s11869-009-0040-4
- Seinfeld J. y Pandis S. (2006). Atmospheric chemistry and physics: From air pollution to climate change. 2a ed. John Wiley & Sons, Inc. Hoboken, EUA, 1225 pp.
- SGC (2015). Informe técnico anual de la actividad volcánica del segmento volcánico norte de Colombia. Servicio Geológico Colombiano. Informe. Manizales, Colombia, 126 pp.
- Tiwary A. y Colls J. (2010). Air pollution: measurement, modelling, and mitigation. 3a ed. Routledge, Nueva York, USA, 522 pp.
- Turalioglu F., Nuhoglu A. y Bayraktar H. (2005). Impacts of some meteorological parameters on SO<sub>2</sub> and TSP concentrations Erzurum, Turkey. *Chemosphere* 59 (11), 1633-1642. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2005.02.003
- Vallero D. (2014). Fundamentals of air pollution. 5a ed. Elsevier, Waltham, EUA, 599 pp.

Vélez J., Orozco M., Duque N. y Aristizábal B. (2015). Entendimiento de fenómenos ambientales mediante análisis de datos. Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, Manizales, Colombia, 132 pp.

WHO (2005). Air quality guidelines. Global update 2005. World Health Organization. Informe. Copenhague, Dinamarca, 484 pp.

Yoo J.M., Jeong M.J., Kim D., Stockwell W.R., Yang J.H., Shin H.W., Lee M.I., Song C.K. y Lee S.D. (2015). Spatiotemporal variations of air pollutants (O<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, CO, PM<sub>10</sub>, and VOCs) with land-use types. *Atmos. Chem. Phys.* 15 (18), 10857-10885. DOI: 10.5194/acp-15-10857-2015

Zapata C.E., Quijano R., Molina E., Rubiano C.M. y Londoño G. (2008). Fortalecimiento de la red de monitoreo de calidad de aire en el Valle de Aburrá con medidores pasivos. *Gestión y Ambiente* 8, 67-84.

---

## ANEXO H

---

### SUPPLEMENTARY MATERIAL

#### HIGH-RESOLUTION AIR QUALITY MODELING IN A MEDIUM-SIZED CITY IN THE TROPICAL ANDES: ASSESSMENT OF LOCAL AND GLOBAL EMISSIONS IN UNDERSTANDING O<sub>3</sub> AND PM<sub>10</sub> DYNAMICS

##### Content

##### **Section A**

Definitions of statistics used in model performance evaluation

##### **Section B**

##### Figures

Figure B.1. Taylor diagram comparing individual statistics ( $r$  correlation coefficient, RMSE, and standard deviation) for O<sub>3</sub> simulation results, among tests with local and global EIs.

Figure B.2. Map with location of O<sub>3</sub> PAS stations. Detailed information about PAS study is described by Cuesta et al. (2017).

Figure B.3. Scatter plots comparing mean O<sub>3</sub> concentrations (ppb) obtained from two PAS campaigns during 2015 in Manizales (urban and rural stations), and mean one-week O<sub>3</sub> concentration (ppb) simulated in this study. Predictions were obtained from the nearest grid point of PAS stations described in Figure B.3.

##### **Tables**

Table B.1. Performance statistics in the preliminary sensitivity analysis.

##### **References**

**Section A.** Definition of statistical performance metrics used in this study. Information was obtained from Carslaw (2015).

1. Mean bias, MB

$$MB = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^N M_i - O_i$$

2. Mean Gross Error, MGE

$$MGE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^N |M_i - O_i|$$

3. Root mean squared error, RMSE

$$RMSE = \left( \frac{\sum_{i=1}^n (M_i - O_i)^2}{n} \right)^{1/2}$$

4. Correlation coefficient, r

$$r = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^n \left( \frac{M_i - \bar{M}}{\sigma_M} \right) \left( \frac{O_i - \bar{O}}{\sigma_O} \right)$$

$O_i$  represents the  $i$ th observed value and  $M_i$  represents the  $i$ th modelled value for a total of  $n$  observations.

## Section B. Figures and Tables

Table B.1. Performance statistics in the preliminary sensitivity analysis.

Variable	Station <sup>a</sup>	Statistics											
		Test_1				Test_2				Test_3			
		MB	MGE	RMSE	r	MB	MGE	RMSE	r	MB	MGE	RMSE	r
T	SGC	-0.99	1.13	1.41	0.93	-1.06	1.23	1.51	0.92	-1.21	1.36	1.61	0.92
	HOS	-2.17	2.17	2.3	0.94	-2.25	2.25	2.39	0.94	-2.46	2.46	2.61	0.92
	NUB	-2.86	2.89	3.12	0.92	-2.95	2.96	3.29	0.88	-2.98	3.01	3.36	0.86
	<i>Overall</i>	<b>-2.01</b>	<b>2.06</b>	<b>2.28</b>	<b>0.93</b>	<b>-2.09</b>	<b>2.15</b>	<b>2.40</b>	<b>0.91</b>	<b>-2.22</b>	<b>2.28</b>	<b>2.53</b>	<b>0.90</b>
RH	SGC	5.16	8.43	9.99	0.67	1.74	6.94	8.95	0.65	1.69	7.19	9.03	0.67
	HOS	3.05	7.14	8.85	0.68	-0.16	7.08	8.84	0.65	0.04	7.36	9.29	0.65
	NUB	11.66	12.79	15.12	0.61	8.36	10.61	12.88	0.59	6.0	9.69	12.28	0.49
	<i>Overall</i>	<b>6.62</b>	<b>9.45</b>	<b>11.32</b>	<b>0.65</b>	<b>3.31</b>	<b>8.21</b>	<b>10.22</b>	<b>0.63</b>	<b>2.58</b>	<b>8.08</b>	<b>10.20</b>	<b>0.60</b>
WS	SGC	1.03	1.26	1.49	-0.02	0.99	1.21	1.46	-0.00	1.01	1.31	1.62	-0.07
	HOS	0.69	1.1	1.32	0.14	0.56	0.93	1.15	0.29	0.70	1.03	1.28	0.32
	NUB	-0.79	1.27	1.59	0.38	-0.92	1.35	1.6	0.46	-0.69	1.16	1.48	0.49
	<i>Overall</i>	<b>0.31</b>	<b>1.21</b>	<b>1.47</b>	<b>0.17</b>	<b>0.21</b>	<b>1.16</b>	<b>1.40</b>	<b>0.25</b>	<b>0.34</b>	<b>1.17</b>	<b>1.46</b>	<b>0.25</b>
WD	SGC	61.89	101.74	133.47	0.13	30.8	90.19	121.24	0.32	44.3	81.53	115.19	0.30
	HOS	54.96	80.27	116.94	0.32	37.87	71.77	110.2	0.37	34.32	58.72	89.60	0.41

Variable	Station <sup>a</sup>	Statistics											
		Test_1				Test_2				Test_3			
		MB	MGE	RMSE	r	MB	MGE	RMSE	r	MB	MGE	RMSE	r
	<b>NUB</b>	21.98	77.13	113.33	0.34	20.75	66.25	98.21	0.55	33.84	73.44	109.89	0.41
	<b>Overall</b>	<b>46.28</b>	<b>86.38</b>	<b>121.25</b>	<b>0.26</b>	<b>29.81</b>	<b>76.07</b>	<b>109.88</b>	<b>0.41</b>	<b>37.49</b>	<b>71.23</b>	<b>104.89</b>	<b>0.37</b>
	<b>SGC</b>	1.54	1.54	1.89	-	0.19	0.19	0.22	-	0.0	0.0	0.0	-
<b>RAIN</b>	<b>HOS</b>	1.7	1.7	2.02	-	0.2	0.2	0.22	-	0.0	0.0	0.0	-
	<b>Overall</b>	<b>1.62</b>	<b>1.62</b>	<b>1.96</b>	-	<b>0.20</b>	<b>0.20</b>	<b>0.22</b>	-	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	
<b>O<sub>3</sub></b>		<b>-7.15</b>	<b>8.41</b>	<b>10.04</b>	<b>0.7</b>	<b>-7.47</b>	<b>9.28</b>	<b>10.76</b>	<b>0.62</b>	<b>-6.64</b>	<b>7.63</b>	<b>8.81</b>	<b>0.81</b>
<b>O<sub>3</sub> (daytime)</b>	<b>GOB</b>	-9.65	9.73	11.27	0.79	-10.45	10.72	12.08	0.78	-7.16	7.65	8.87	0.83
<b>O<sub>3</sub> (nighttime)</b>		-4.87	7.21	8.77	0.09	-4.75	7.96	9.39	-0.07	-6.17	7.61	8.75	0.23

<sup>a</sup> At SGC and HOS stations: number of data (n) = 151. At NUB station: n = 73.

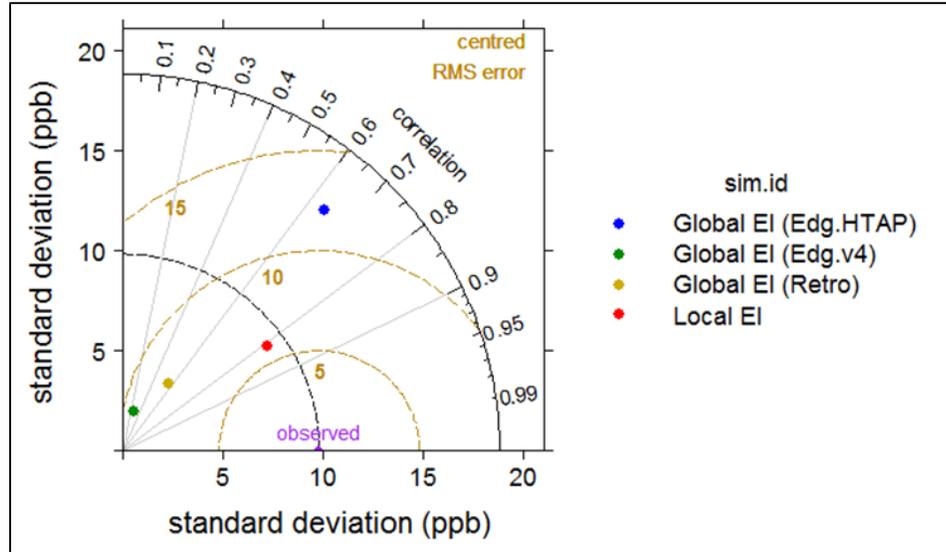


Figure B.1. Taylor diagram comparing individual statistics ( $r$  correlation coefficient, RMSE, and standard deviation) for  $O_3$  simulation results, among tests with local and global EIs.

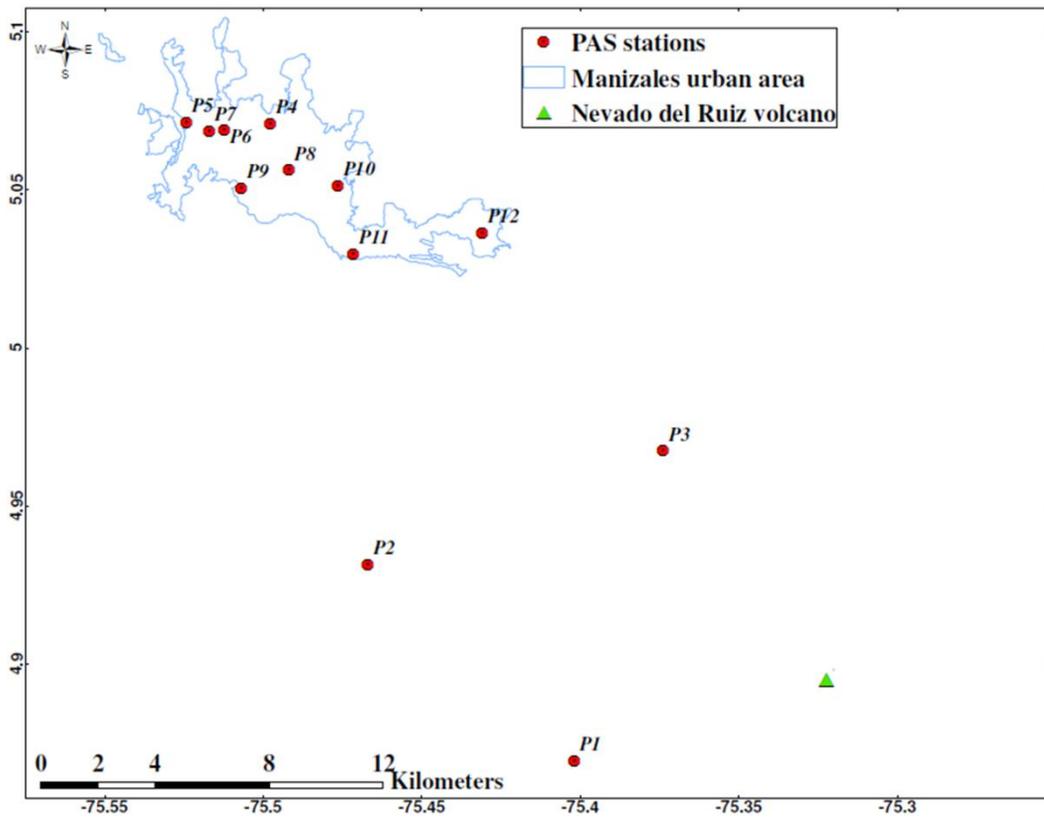
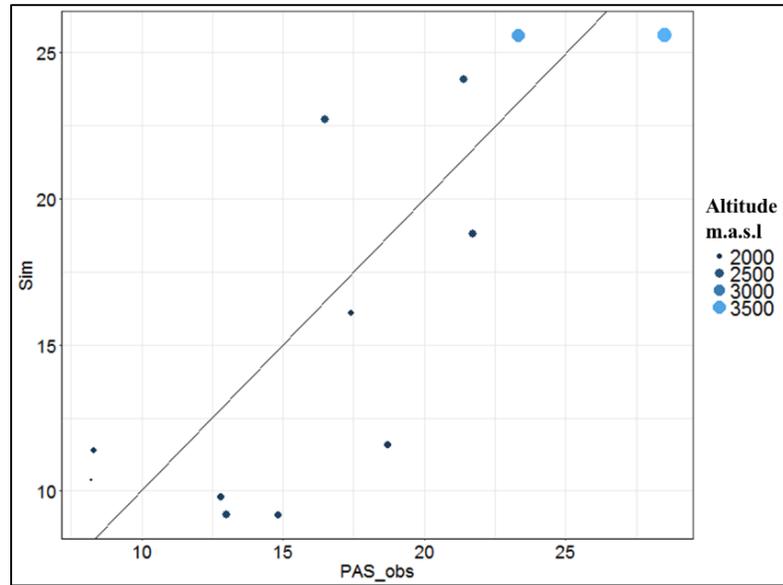


Figure B.2. Map with location of  $O_3$  PAS stations. Detailed information about PAS study is described by Cuesta et al. (2017).



**Figure B.3. Scatter plots comparing mean O<sub>3</sub> concentrations (ppb) obtained from two PAS campaigns during 2015 in Manizales (urban and rural stations), and mean one-week O<sub>3</sub> concentration (ppb) simulated in this study. Predictions were obtained from the nearest grid point of PAS stations described in Figure B.3.**

## References

Carslaw, D.C., 2015. The openair manual — open-source tools for analyzing air pollution data. Manual for version 1.1-4. King's College London.

---

## REFERENCIAS

---

Alonso, M.F., Longo, K.M., Freitas, S.R., da Fonseca, R.M., Marécal, V., Pirre, M., Klenner, L.G., 2010. An urban emissions inventory for South America and its application in numerical modeling of atmospheric chemical composition at local and regional scales. *Atmos. Environ.* 44, 5072-5083.

Amato, F., Pandolfi, M., Moreno, T., Furger, M., Pey, J., Alastuey, A., Bukowiecki, N., Prevot, A.S.H., Baltensperger, U., Querol, X., 2011. Sources and variability of inhalable road dust particles in three European cities. *Atmos. Environ.* 45 6777-6787.

Arango, J. H., 2009. Calidad de los combustibles en Colombia. *Revista de ingeniería. Universidad de los Andes.*

Arango, C.D., 2014. Identificación de patrones de circulación atmosférica en el Valle de Sogamoso y estimación de su impacto en la calidad del aire mediante un modelo meteorológico avanzado y análisis de trayectorias. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá. Bogotá D.C., Colombia. Disponible en: <http://www.bdigital.unal.edu.co/46490/1/01194143.2014.pdf>. Consultado en enero de 2017 (Master Thesis).

Área Metropolitana del Valle de Aburrá (AMVA), 2016. Informe N°26. Convenio interadministrativo N° 326 de 2014. Aunar esfuerzos para operar la red de monitoreo de calidad del aire, meteorología y ruido, en el Valle de Aburrá. Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín. Medellín, Colombia.

Arellano, C., 2013. Condições meteorológicas e níveis de poluição na Região Metropolitana de Lima – Perú. Universidad de Sao Paulo. Sao Paulo, Brasil (Master Thesis).

Aristizábal, B.H., González, C.M., Morales, L., Abalos, M., Abad, E., 2011. Polychlorinated dibenzo-p-dioxin and dibenzofuran in urban air of an Andean city. *Chemosphere* 85, 170-178.

Baublitz, C., Henderson, B.H., Rincon, A., Galvis, B., Pachon, J.E., 2014. SMOKE Implementation and CMAQ Preliminary Evaluation for Bogota, Colombia. 13th Annual CMAS Conference Archive. Chapel Hill, NC. Disponible en <https://www.cmascenter.org/conference/2014/agenda.cfm>.

Behrentz, E., Sánchez, N., Fandiño, M., Rodríguez, P., 2009. Elementos Técnicos del Plan Decenal de Descontaminación de Bogotá. Parte 2: Inventario de Emisiones Provenientes de Fuentes Fijas y Móviles. Contrato de Ciencia y Tecnología No. 347 de 2006 entre la Secretaría Distrital de Ambiente de Bogotá y el Grupo de Estudios en Sostenibilidad Urbana y Regional de la Universidad de Los Andes. Bogotá, Colombia.

Beltrán, D., Belalcázar, L.C., Rojas, N., 2012. Emisiones vehiculares de material particulado (PM<sub>2.5</sub> y PM<sub>10</sub>) por resuspensión de polvo y abrasión en Bogotá. *Revista de Ingeniería Sanitaria y Ambiental* 231, 25-32.

Borge, R., Lumbreras, J., Pérez, J., de la Paz, D., Vedrenne, M., de Andrés, J.M., Rodríguez, M.E., 2014. Emission inventories and modeling requirements for the development of air quality plans. Application to Madrid (Spain). *Sci. Total Environ.* 466–467, 809–819.

CONPES 3344, 2005. Lineamientos para la formulación de la política de prevención y control de la contaminación del aire. Bogotá, D.C., Colombia.

CONPES 3550, 2008. Lineamientos para la formulación de la política integral de salud ambiental con énfasis en los componentes de calidad de aire, calidad de agua y seguridad química en Colombia. Bogotá, D.C., Colombia.

CORPOCALDAS, 2014. Medición de ruido ambiental en la ciudad de Manizales. Manizales, Colombia.

CORPOCALDAS, 2015. Mediciones de ruido ambiental y elaboración del plan de descontaminación por ruido en Villamaría, Caldas. Bogotá, Colombia.

Cortés, A.C., 2010. Análisis de la variabilidad espacial y temporal de la precipitación en una ciudad de media montaña andina. Caso de estudio: Manizales. Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales. Manizales, Colombia (Master Thesis).

Cortés, G.P., López, C.M., n.d. La gestión de riesgo volcánico. Síntesis actividad volcán Nevado del Ruiz con énfasis en el periodo 2010 – 2015. Servicio Geológico Colombiano - Observatorio Vulcanológico y Sismológico de Manizales. Manizales, Colombia.

- Cortés, J., González, C.M., Morales, L., Abalos, M., Abad, E., Aristizábal, B.H., 2014. PCDD/PCDF and dl-PCB in the ambient air of a tropical Andean city: Passive and active sampling measurements near industrial and vehicular pollution sources. *Sci. Total Environ.* 491–492, 67–74.
- Cortés, J., Cobo, M., González, C.M., Gómez, C.D., Abalos, M., Aristizábal, B.H., 2016. Environmental variation of PCDD/Fs and dl-PCBs in two tropical Andean Colombian cities using passive samplers. *Sci. Total Environ.* 568, 614–623.
- Cuchiara, G.C., Li, X., Carvalho, J., Rappenglück, B., 2014. Intercomparison of planetary boundary layer parameterization and its impacts on surface ozone concentration in the WRF/Chem model for a case study in Houston/Texas. *Atmos. Environ.* 96, 175–185.
- Cuesta, A.P., 2017. Estudio del impacto de las emisiones antropogénicas y geogénicas de dióxido de azufre, en la calidad del aire de Manizales. Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales. Manizales, Colombia (Master Thesis).
- DAGMA, 2012. Fortalecimiento tecnológico de la red de monitoreo de calidad del aire y evaluación de la contaminación atmosférica de la ciudad de Santiago de Cali. Disponible en [www.cali.gov.co/descargar.php?idFile=9534&plantilla=admin](http://www.cali.gov.co/descargar.php?idFile=9534&plantilla=admin)
- Dávila, C.P., 2015. Desagregación espacio-temporal del inventario de emisiones de contaminantes atmosféricos por fuentes fijas y móviles en Cundinamarca. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá. Bogotá D.C., Colombia (Master Thesis).
- Davis, N., Lents, J., Osses, M., Nikkila, N., Barth, M., 2005. Development and application of an international vehicle emissions model. Transportation Research Board 81st Annual Meeting, Washington D.C. Disponible en: [http://www.issrc.org/ive/downloads/presentations/IVE\\_TRB\\_2005.pdf](http://www.issrc.org/ive/downloads/presentations/IVE_TRB_2005.pdf). Consultado en marzo de 2015.
- D'Angiola, A., Dawidowski, L.E., Gómez, D.R., Osses, M., 2010. On-road traffic emissions in a megacity. *Atmos. Environ.* 44, 483–493. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.11.004>.
- de Nevers, N., 2000. Air pollution control engineering. McGraw-Hill, 2nd edition. Singapore.
- Dudhia, J., 2015. WRF 2015 tutorial presentations – Physics. Disponible en: [http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/tutorial/tutorial\\_presentation\\_winter\\_2015.htm](http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/tutorial/tutorial_presentation_winter_2015.htm)
- Escobar, D.A., García, F.J., 2012. Diagnóstico de la movilidad urbana de Manizales. Disponible en: [http://www.uneditorial.net/uflip/Diagnostico\\_de\\_movilidad\\_urbana\\_de\\_manizales/pubData/source/Diagnostico\\_de\\_movilidad\\_urbana\\_de\\_manizales.pdf](http://www.uneditorial.net/uflip/Diagnostico_de_movilidad_urbana_de_manizales/pubData/source/Diagnostico_de_movilidad_urbana_de_manizales.pdf). Consultado en febrero de 2017.
- Ecopetrol, n.d. Catálogo de productos – Hidrocarburos. Disponible en: [http://www.ecopetrol.com.co/especiales/Catalogo\\_de\\_Productos/](http://www.ecopetrol.com.co/especiales/Catalogo_de_Productos/) Consultado en abril de 2014.
- Fernández, R., Cremades, P., Allende, D., Puliafito, S. (2010). Sensitivity analysis of the spatial and altitude distributions of pollutants using the Weather Research and Forecasting Model with Chemistry (Wrf/Chem). *Mecánica Computacional* 29, 8087–8108.
- Franco, J.F., 2012. Contaminación atmosférica en centros urbanos. Desafío para lograr su sostenibilidad: caso de estudio Bogotá. *Revista EAN* 72, 193–204. Disponible en: [http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0120-81602012000100013&lng=en&tlng=es](http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0120-81602012000100013&lng=en&tlng=es). Consultado en febrero de 2017.
- Freitas, S.R., Longo, K.M., Silva Dias, M.A.F., Chatfield, R., Silva Dias, P., Artaxo, P., Andreae, M.O., Grell, G., Rodrigues, L.F., Fazenda, A., Panetta, J., 2009. The Coupled Aerosol and Tracer Transport model to the Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System (CATT-BRAMS) – Part 1 : Model description and evaluation. *Atmos. Chem. Phys.* 9, 2843–2861.
- Freitas, S.R., Longo, K.M., Alonso, M.F., Pirre, M., Marecal, V., Grell, G., Stockler, R., Mello, R.F., Spanchez-Gácita, M., 2011. PREP-CHEM-SRC – 1.0: a preprocessor of trace gas and aerosol emission fields for regional and global atmospheric chemistry models. *Geosci. Model Dev.* 4, 419–433.
- Gallardo, L., Escribano, J., Dawidowski, L., Rojas, N., Andrade, M.F., Osses, M., 2012. Evaluation of vehicle emission inventories for carbon monoxide and nitrogen oxides for Bogotá, Buenos Aires, Santiago, and Sao Paulo. *Atmos. Environ.* 47, 12–19.
- Gavidia, M.E., 2015. Impacto das condições de contorno químicas na representação do ozônio troposférico na Região Metropolitana de São Paulo com o modelo WRF-Chem. Universidad de Sao Paulo. Sao Paulo, Brasil (Master Thesis).
- Giraldo, L., Behrentz, E., Ardila, A., 2005. Estimación del inventario de emisiones de fuentes móviles para la ciudad de Bogotá e identificación de variables pertinentes. Disponible en: <http://dspace.uniandes.edu.co:9090/xmlui/handle/1992/939>

- Golub, E., Klytchnikova, I., Sanchez-Martinez, G., Belausteguigoitia, J.C., 2014. Environmental Health Costs in Colombia: the Changes from 2002 to 2010. Latin America and Caribbean Region. Environment and Water Resources. Occasional Paper Series. World Bank Group, Washington, DC. Disponible en: <http://documents.worldbank.org/curated/en/657631468047104545/Environmentalhealth-costs-in-Colombia-the-changes-from-2002-to-2010>. Consultado en septiembre de 2016.
- González, C.M., 2012. Calidad del aire en la zona centro y oriente de la ciudad de Manizales. Influencia del material particulado (PM<sub>10</sub>) y lluvia ácida. Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales. Manizales, Colombia (Master Thesis).
- González, C.M., Aristizábal, B.H., 2012. Acid rain and particulate matter dynamics in a mid-sized Andean city: The effect of rain intensity on ion scavenging. *Atmos. Environ.* 60, 164-171.
- González, C.M., Cortés, J., Aristizábal, B.H., 2015. Influence of meteorology and source variation on airborne PM<sub>10</sub> levels in a high relief tropical Andean city. *Rev. Fac. Ing. Univ. Antioquia* 74, 200-212.
- Grell, G.A., Peckham, S.E., Schmitz, R., McKeen, S.A., Frost, G., Skamarock, W.C., Eder, B., 2005. Fully coupled "online" chemistry within the WRF model. *Atmos. Environ.* 39, 6957-6975.
- Grell, G., Baklanov, A., 2011. Integrated modeling for forecasting weather and air quality: A call for fully coupled approaches. *Atmos. Environ.* 45, 6845-6851.
- HariPrasad, K.B.R.R., Srinivas, C.V., Singh, A.B., Rao, S.V.B., Baskaran, R., Venkatraman, B., 2014. Numerical simulation and intercomparison of boundary layer structure with different PBL schemes in WRF using experimental observations at a tropical site *Atmos. Res.* 145-146, 27-44.
- Henríquez, P., 2007. Estudio comparativo de actividad vehicular y modelación de emisiones para Santiago y Buenos Aires. Universidad de Chile. Santiago de Chile, Chile (Bachelor Thesis).
- Hong, S-Y., Lim, J-O.J., 2006. The WRF Single-Moment 6-Class microphysics scheme (WSM6). *Journal of The Korean Meteorological Society* 42, 129-151.
- Hu, X., Nielsen-Gammon, J.W., Zhang, F., 2010. Evaluation of Three Planetary Boundary Layer Schemes in the WRF Model. *J. Appl. Meteorol.* 49, 1831-1844.
- Huggel, C., Scheel, M., Albrecht, F., Andres, N., Calanca, P., Jurt, C., Khabarov, N., Mira-Salama, D., Rohrer, M., Salzmann, N., Silva, Y., Silvestre, E., Vicuña, L., Zappa, M., 2015. A framework for the science contribution in climate adaptation: Experiences from science-policy processes in the Andes. *Environ. Sci. Policy.* 47, 80-94.
- Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC), 2005. Guía de elaboración y usos de inventarios de emisiones. México, D.F. Disponible en: <http://www.inecc.gob.mx/descargas/publicaciones/457.pdf>. Consultado en febrero de 2017.
- ISSRC (International Sustainable Research Center), 2008. IVE Model Users Manual Version 2.0. Disponible en: <http://www.issrc.org/ive/downloads/manuals/UsersManual.pdf>. Consultado en enero de 2014.
- Jiménez-Guerrero, P., Jorba, O., Baldasano, J.M., Gassó, S., 2008. The use of a modelling system as a tool for air quality management: annual high-resolution simulations and evaluation. *Science of the Total Environment* 390, 323-340.
- Jimenez-Palacios, J.L., 1999. Understanding and Quantifying Motor Vehicle Emissions with Vehicle Specific Power and TILDAS Remote Sensing. Massachusetts Institute of Technology (Ph.D. Thesis).
- Jiménez, J.F., 2016. Altura de la Capa de Mezcla en un área urbana, montañosa y tropical. Caso de estudio: Valle de Aburrá (Colombia). Universidad de Antioquia. Medellín, Colombia. (Ph.D. Thesis).
- Kumar, A., Jiménez, R., Belalcázar, L.C., Rojas, N.Y., 2016. Application of WRF-Chem Model to Simulate PM<sub>10</sub> Concentration over Bogotá. *Aerosol Air. Qual. Res.* 16, 1206-1221.
- La Patria, 2016. Estaciones de servicio, todo un surtido. Nota periodística publicada el 18 de abril. Disponible en: <http://www.lapatria.com/economia/estaciones-de-servicio-todo-un-surtido-252045>. Consultado en octubre de 2017.
- Lents, J., Walsh, M., He, K., Davis, N., Osses, M., Tolvet, S., Liu, H., n.d. Handbook of air quality management. Disponible en: <http://www.aqbook.org/>. Consultado en marzo de 2017.
- Lin, Y.-L., 2007. Mesoscale Dynamics. Cambridge University Press, New York.
- Liu, J., Bray, M., Han, D., 2012. Sensitivity of the Weather Research and Forecasting (WRF) model to downscaling ratios and storm types in rainfall simulation. *Hydrol. Process.* 26, 3012-3031.
- Londoño, J., Correa, M.A., Palacio, C.A., 2011. Estimación de las emisiones de contaminantes Atmosféricos provenientes de fuentes móviles en el área urbana de Envigado, Colombia. In Spanish. *Revista EIA* 16, 149-162.

- Longo, K.M., Freitas, S.R., Pirre, M., Marécal, V., Rodrigues, L.F., Panetta, J., Alonso, M.F., Rosário, N.E., Moreira, D.S., Gácita, M.S., Arteta, J., Fonseca, R., Stockler, R., Katsurayama, D.M., Fazenda, A., Bela, M., 2013. The chemistry CATT-BRAMS model (CCATT-BRAMS 4.5): a regional atmospheric model system for integrated air quality and weather forecasting and research. *Geosci. Model Dev.* 6, 1173-1222.
- Manizales Cómo Vamos, 2013. Informe de calidad de vida Manizales 2013. Disponible en: <http://manizalescomovamos.org/informe-de-calidad-de-vida-2013/>. Consultado en febrero de 2016.
- Manizales Cómo Vamos, 2016. Informe de calidad de vida Manizales 2016. Disponible en: <http://manizalescomovamos.org/5151/>. Consultado en noviembre de 2016.
- Manizales Cómo Vamos, 2017. Informe de calidad de vida Manizales 2017. Disponible en: <http://manizalescomovamos.org/6343-2/>. Consultado en julio de 2017.
- Marín, A., 2009. Análisis comparativo de mecanismos de reacción química del modelo de pronóstico de calidad del aire aplicado al Valle de Aburrá. Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia (Master Thesis).
- Méndez, J.F., Pinto, L.C., Galvis, B.R., Pachón, J.E., 2017. Estimación de factores de emisión de material particulado resuspendido antes, durante y después de la pavimentación de una vía en Bogotá. *Ciencia e Ingeniería Neogranadina* 27 43-60.
- Merkisz, J., Kozak, M., Bielaczyc, P., Szczotka, A., 2002. An investigation of influence of diesel fuel sulphur content on particulates emissions from direct injection common rail diesel vehicle. *Journal of KONES* 3-4, 1231-4005.
- Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial (MAVDT), 2009. Protocolo para el monitoreo y seguimiento de la calidad del aire - Manual para la elaboración de Planes de Gestión de la Calidad del Aire. Bogotá, D.C., Colombia.
- Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial (MAVDT), 2010a. Política de prevención y control de la contaminación del aire. Bogotá, D.C., Colombia.
- Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial (MAVDT), 2010b. Resolución 650 de 2010. Por la cual se adopta el Protocolo para el Monitoreo y Seguimiento de la Calidad del Aire. Bogotá, D.C., Colombia.
- Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial (MAVDT), 2010c. Resolución 610 de 2010. Por la cual se modifica la Resolución 601 del 4 de abril de 2006. Bogotá, D.C., Colombia.
- Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial (MAVDT), n.d. Manual de fundamentos y planeación de inventarios de emisiones. Disponible en: [http://www.minambiente.gov.co/documentos/3110\\_1\\_Planeacion.pdf](http://www.minambiente.gov.co/documentos/3110_1_Planeacion.pdf). Consultado en septiembre de 2014.
- Muñoz, A.G., López, P., Velásquez, R., Monterrey, L., León, G., Ruiz, F., Recalde, C., Cadena, J., Mejía, R., Paredes, M., Bazo, J., Reyes, C., Carrasco, G., Castellón, Y., Villarroel, C., Quintana, J., Urdaneta, A., 2010. An Environmental Watch System for the Andean Countries: El Observatorio Andino. *B. Am. Meteorol. Soc.*, 91, 1645-1652.
- Muñoz, A.G., Ruiz-Carrascal, D., Ramírez, P., León, G., Quintana, J., Bonilla, A., Torres, W., Pastén, M., and Sánchez, O., 2012. Risk Management at the Latin American Observatory. *Risk Management – Current Issues and Challenges*, InTech Publications. 533-556.
- Nedbor-Gross, R., Henderson, B.H., Davis, J.R., Baublitz, C., Pachón, J.E., Rincón, A., Galvis, B., 2014. Implementation of a WRF-CMAQ Air Quality Modeling System in Bogotá, Colombia. 13th Annual CMAS Conference Archive. Chapel Hill, NC. Available online at <https://www.cmascenter.org/conference/2014/agenda.cfm>.
- Nedbor-Gross, R., Henderson, B.H., Pérez-Peña, M.P., Pachón, J.E., 2017. Air quality modeling in Bogotá, Colombia using local emissions and natural mitigation factor adjustment for re-suspended particulate matter. *Atmos. Pollut. Res.* In Press.
- Parra, R., Jiménez, P., Baldasano, J.M., 2006. Development of the high spatial resolution EMICAT2000 emission model for air pollutants from the north-eastern Iberian Peninsula (Catalonia, Spain). *J. Environ. Pollut.* 140, 200-219.
- Peckham, S., Grell, G., McKeen, S., Ahmadov, R., Marrapu, P., Barth, M., Pfister, G., Wiedinmyer, C., Fast, J., Gustafson, W., Ghan, S., Zaveri, R., Easter, R., Barnard, J., Chapman, E., Hewson, M., Schmitz, R., Salzmann, M., Freitas, S., 2015a. WRF-Chem Version 3.7 Users Guide. National Center for Atmospheric Research (NCAR), USA.
- Peckham, S., Grell, G., McKeen, S., Ahmadov, R., Marrapu, P., Barth, M., Pfister, G., Wiedinmyer, C., Fast, J., Gustafson, W., Ghan, S., Zaveri, R., Easter, R., Barnard, J., Chapman, E., Schmitz, R., Beck, V., Freitas, S., 2015b. WRF-Chem Emissions Guide. National Center for Atmospheric Research (NCAR), USA.
- Pérez-Peña, M.P., Henderson, B.H., Nedbor-Gross, R., Pachón, J.E., 2017. Natural mitigation factor adjustment for re-suspended particulate matter emissions inventory for Bogotá, Colombia. *Atmos. Pollut. Res.* 8, 29-37.

- Poveda, G., 2004. La hidroclimatología de Colombia: Una síntesis desde la escala inter-decadal hasta la escala diurna. *Rev. Acad. Colomb. Cienc.* 28, 201-222.
- Pulles, T., Heslinga, D., n.d. The Art of Emission Inventorying. TNO-Environment and Geosciences. Disponible en: [http://www.csb.gov.tr/db/necen/editordosya/file/NEC/CollectER\\_Training/The\\_Art\\_of\\_Emission\\_Inventorying.pdf](http://www.csb.gov.tr/db/necen/editordosya/file/NEC/CollectER_Training/The_Art_of_Emission_Inventorying.pdf). Consultado en Abril de 2016.
- Reynolds, A.W., Broderick, B.M., 2000. Development of an emissions inventory model for mobile sources. *Transportation Research Part D* 5, 77-101.
- Rincón, M.A., 2015. Simulación regional de contaminantes atmosféricos para la Ciudad de Bogotá. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá. Bogotá D.C., Colombia (Master Thesis).
- Rodríguez, P.A., Behrentz, E., 2009. Actualización del inventario de emisiones de fuentes móviles para la ciudad de Bogotá a través de mediciones directas. Universidad de los Andes, Colombia. Disponible en: [https://biblioteca.uniandes.edu.co/Tesis\\_12009\\_primer\\_semestre/524.pdf](https://biblioteca.uniandes.edu.co/Tesis_12009_primer_semestre/524.pdf)
- Rojas, A.L., 2015. Estimación de emisiones de contaminantes provenientes de fuentes móviles en la jurisdicción CAR. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá. Bogotá D.C., Colombia (Master Thesis).
- Saide, P., Zah, R., Osses, M., Ossés de Eicker, M., 2009. Spatial disaggregation of traffic emission inventories in large cities using simplified top-down methods. *Atmos. Environ.* 43, 4914-4923.
- Secretaría Distrital de Ambiente (SDA), 2016. Informe anual de calidad del aire de Bogotá. Año 2015. Bogotá, Colombia.
- Secretaría Distrital de Ambiente (SDA), 2017. Documento técnico de soporte. Modificación del decreto 98 de 2011. Subdirección de Calidad del Aire, Auditiva y Visual – SCAAV. Disponible en: [http://www.ambientebogota.gov.co/c/document\\_library/get\\_file?uuid=d134928c-8756-4a69-ad18-ff09bb822fef&groupId=3564131](http://www.ambientebogota.gov.co/c/document_library/get_file?uuid=d134928c-8756-4a69-ad18-ff09bb822fef&groupId=3564131). Consultado en octubre de 2017.
- Seinfeld, J.H., Pandis, S.N., 2006. *Atmospheric chemistry and physics: From air pollution to climate change*. John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, New Jersey.
- Servicio Geológico Colombiano (SGC), 2015. Informe de actividad volcánica segmento norte de Colombia. Julio de 2015. Manizales, Colombia.
- Skamarock, W.C., Klemp, J.B., Dudhia, J., Gill, D.O., Barker, D.M., Duda, M.G., Huang, X., Wang, W., Powers, J.G., 2008. A description of the Advanced Research WRF version 3: NCAR technical note. Mesoscale & Microscale Meteorology Division, National Center for Atmospheric Research (NCAR), USA.
- Stockwell, W.R., Middleton, P., Chang, J.S., Tang, X., 1990. The second generation Regional Acid Deposition Model chemical mechanism for regional air quality modeling. *J. Geophys. Res.* 95, 16343-16367.
- Stuefer, M., Freitas, S.R., Grell, G., Webley, P., Peckham, S., McKeen, S A., Egan, S.D., 2013. Inclusion of ash and SO<sub>2</sub> emissions from volcanic eruptions in WRF-Chem: development and some applications. *Geoscientific Model Development* 6, 457-468.
- Tian, J., Liu, J., Yan, D., Li, C., Yu, F., 2017. Numerical rainfall simulation with different spatial and temporal evenness by using a WRF multiphysics ensemble. *Nat. Hazards Earth Syst. Sci.* 17, 563-579.
- Tolvett, S.A., 2009. Analisis de emisiones en ruta de vehiculos diesel en Ciudad de México, Santiago y Sao Paulo. Santiago de Chile, Chile (Master Thesis).
- Toro, M.V., Cremades, L.V., Quiceno, R., Ramirez, J., Zuluaga, C., Moussiopoulos, N., 2001. Emission Inventory in Medellín (Colombia) city. An Approximation. 3rd International Conference on Urban Air Quality & 5th SATURN Workshop. Loutraki (Greece).
- Toro, M.V., Cremades, L.V., Calbó, J., 2006. Relationship between VOC and NO<sub>x</sub> emissions and chemical production of tropospheric ozone in the Aburrá Valley (Colombia). *Chemosphere* 65, 881-888.
- Toro, M.V., Serna, J., Álvarez, N.W., Sánchez, C.G., Ospina, F.E., Quiceno, D.M., Zapata, J.D., 2010. Simulaciones especiales tarea 1: Optimización del inventario de emisiones atmosféricas. In Spanish. Convenio de Asociación No. 543 de 2008. Medellín, Colombia.
- Toro, M.V., Molina, E., García, P., Quiceno, D.M., Londoño, A., Acevedo, L.F., 2013. Inventario de Emisiones Atmosféricas del Valle de Aburrá, año base 2011. In Spanish. Convenio de Asociación No. 243 de 2012. Medellín, Colombia.
- Toro, M.V., Molina, E., Quiceno, D.M., Ospina, F.E., Acevedo, L.F., Jaramillo, M.L., Arcos, O.F., Orrego, A., Arteaga, D.C., 2015. Inventario de Emisiones Atmosféricas del Valle de Aburrá, año base 2013. Convenio de Asociación No. CA 315 de 2014. Medellín, Colombia.

- Toro, M.V., Molina, E., Roldán, J.C., González, M.I., Jaramillo, M.L., Arcos, O.F, Villegas, A.O., Ruiz, S., 2017. Inventario de Emisiones Atmosféricas del Valle de Aburrá, actualización 2015. Convenio de Asociación No. CA 335 de 2016. Medellín, Colombia.
- Tuia, D., Ossés de Eicker, M., Zah, R., Osses, M., Zarate, E., Clappier, A. 2007. Evaluation of a simplified top-down model for the spatial assessment of hot traffic emissions in mid-sized cities. *Atmos. Environ.* 41, 3658–3671.
- UN (United Nations), 2014. *World Urbanization Prospects: The 2014 Revision, Highlights*. Department of Economic and Social Affairs, Population Division, New York.
- Vara-Vela, A.L., 2013. *Avaliação do impacto da mudança dos fatores de emissão veicular na formação de ozônio troposférico na Região Metropolitana de São Paulo (RMSP)*. Universidad de Sao Paulo. Sao Paulo, Brasil (Master Thesis).
- Vara-Vela, Á., Á.G. Muñoz y A. Lomas, OLE2-AAS4WRF, 2011: OLE2's Another Assimilation System for WRF\_Chem. Observatorio Latinoamericano de Eventos Extraordinarios (OLE2). Disponible en: [http://www.cmc.org.ve/mediawiki/index.php?title=Calidad\\_de\\_Aire](http://www.cmc.org.ve/mediawiki/index.php?title=Calidad_de_Aire) Consultado en mayo de 2016.
- Vara-Vela, A., Andrade, M.F., Kumar, P., Ynoue, R.Y., Muñoz, A.G., 2016. Impact of vehicular emissions on the formation of fine particles in the Sao Paulo Metropolitan Area: a numerical study with the WRF-Chem model. *Atmos. Chem. Phys.* 16, 777–797. doi:10.5194/acp-16-777-2016.
- Velasco, M., 2015. *Evaluación de la concentración y caracterización preliminar del PM10 en la ciudad de Manizales*. Universidad del Valle. Santiago de Cali, Colombia (Master Thesis).
- Velasco, M., 2016. *Informe Sistema de Vigilancia de Calidad del Aire-2016*. Subdirección de Evaluación y Seguimiento Ambiental, Corpocaldas. Disponible en: <http://www.corpocaldas.gov.co/publicaciones/543/Informe%20SVCA%20Corpocaldas%202016.pdf>. Consultado en enero de 2017.
- Vélez, J.J., Valencia, M., Londoño, A., González, C.M., Mariscal, J.P., 2010. *Contaminación del aire y Lluvia ácida: Diagnóstico del fenómeno para la ciudad de Manizales*. Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, Manizales, Colombia.
- Vivanco, M.G., Andrade, M., 2006. Validation of the emission inventory in the Sao Paulo Metropolitan Area of Brazil, based on ambient concentrations ratios of CO, NMOG and NOx and on a photochemical model. *Atmos. Environ.* 40, 1189–1198.
- Wang, W., Bruyère, C., Duda, M., Dudhia, J., Gill, D., Lin, H-C., Michalakes, J., Rizvi, S., Zhang, X., 2009. *Advanced Research WRF (ARW) Version 3 Modeling User's Guide*. Mesoscale & Microscale Meteorology Division, National Center for Atmospheric Research (NCAR), USA.
- World Health Organization (WHO), 2006. *WHO Air quality guidelines for particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide. Global update 2005. Summary of risk assessment*. Geneva, Switzerland.
- World Health Organization (WHO), 2016. *Ambient air pollution: a global assessment of exposure and burden disease*. Geneva, Switzerland.
- World Meteorological Organization (WMO), 2008. *Guide to Meteorological Instruments and Methods of Observation*. Séptima edición. Ginebra, Suiza.
- Zarate, E., Belalcazar, L. C., Clappier, A., Manzi, V., Vandenbergh, H., 2007. Air quality modelling over Bogota, Colombia: Combined techniques to estimate and evaluate emission inventories. *Atmos. Environ.* 41, 6302-6318.