

PROGRAMA PILOTO DE OBSERVACIÓN ATMOSFÉRICA PARA LA VALIDACIÓN DE PRODUCTOS SATELITALES REFERENTES A LA DETERMINACIÓN DE LAS EMISIONES TROPOSFÉRICAS

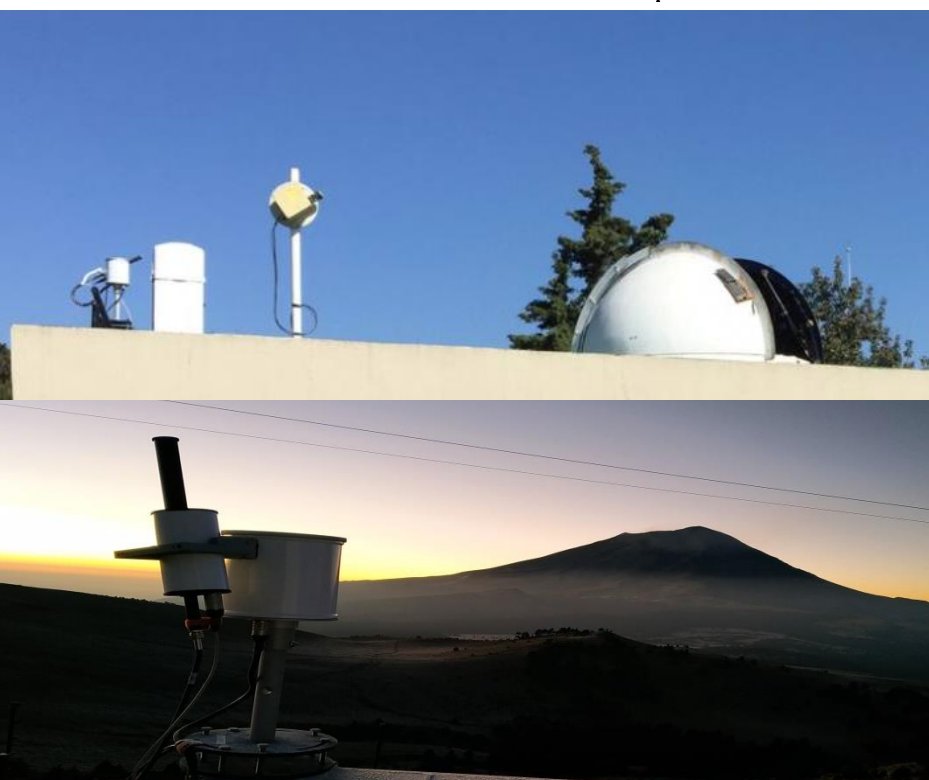
Informe Final

Convenio No. INECC-A1-002-2019



2019

COORDINACIÓN GENERAL DE CONTAMINACIÓN Y SALUD AMBIENTAL



Preparado por:

Michel Grutter, Claudia Rivera, Wolfgang Stremme, Martina M. Friedrich, Alejandro Bezanilla, Zuleica Ojeda, Noemie Taquet, Benedetto Schiavo, Agustín Fernández
Centro de Ciencias de la Atmósfera,
Universidad Nacional Autónoma de México

Bldv. Adolfo Ruiz Cortines 4209, Col.
Jardines en la Montaña, Tlalpan, Ciudad
de México, C.P. 14210,
Tel 5424 6400. Fax. +52 (55) 54245404.
<http://www.gob.mx/inecc>

10 de diciembre de 2019

DR © Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático
Blvd. Adolfo Ruiz Cortines 4209, Col. Jardines en la Montaña,
Tlalpan, Ciudad de México, C.P. 14210, Tel 5424 6400.
<http://www.gob.mx/inecc>

Directorio

Dra. María Amparo Martínez Arroyo
Directora General del INECC

Dr. Arturo Gavilán García
Director de Investigación de Contaminantes, Sustancias, Residuos y Bioseguridad

M. en C. Roberto Basaldud Cruz
Subdirector de Investigación de Exposición a la Contaminación

Autores

Michel Grutter, Claudia Rivera, Wolfgang Stremme, Martina M. Friedrich,
Alejandro Bezanilla, Zuleica Ojeda, Noemie Taquet, Benedetto Schiavo, Agustín
Fernández

Centro de Ciencias de la Atmósfera, Universidad Nacional Autónoma de México

Coordinación

Dr. Arturo Gavilán García
Director de Investigación de Contaminantes, Sustancias, Residuos y Bioseguridad

M. en C. Roberto Basaldud Cruz
Subdirector de Investigación de Exposición a la Contaminación

Resumen

En este informe técnico se presentan los avances en el desarrollo llevado a cabo en México para montar las metodologías para la medición la concentración integrada de la columna vertical de ciertos contaminantes atmosféricos. Con esta información, además de ser de gran utilidad para la comunidad científica ya que nos ayuda a conocer la variabilidad temporal de gases que son clave para entender la evolución e impacto de los procesos y actividades que contribuyen a sus emisiones, también nos permite establecer el marco de referencia que se necesita para la validación de información generada por instrumentos satelitales.

En este programa piloto evaluamos productos de plataformas satelitales en órbitas polares bajas que circundan la Tierra que se encuentran disponibles y se emplean comúnmente para la obtención de la distribución espacial de contaminantes atmosféricos. Los estudios comparativos con estos productos, que están limitados en cuanto a la resolución espacial y frecuencia de observación (en el mejor de los casos una por día), nos ayudan a conocer sus incertidumbres y problemáticas asociadas. Por otro lado, las investigaciones que se presentan en este trabajo nos permiten avanzar en establecer las metodologías que serán necesarias para validar las mediciones de la primer misión de un instrumento de esta naturaleza que observará desde una órbita geoestacionaria. La NASA estipula el lanzamiento del instrumento TEMPO para principios del 2022.

Siendo que buena parte del territorio mexicano estará en el campo de visión de este instrumento, nuestro grupo de trabajo ya trabaja cercanamente con el equipo científico de la misión para diseñar y poner en marcha una estrategia de validación, junto con los colegas de EUA, Canadá y de otras partes del mundo. Este documento contiene una descripción de las metodologías empleadas para la obtención de esta información, de la ubicación y sitios de medición con los equipos de percepción remota que se han puesto en marcha para dicho propósito y del formato de los datos generados. Además, se anexa a este documento en formato digital:

- La base de datos con las columnas verticales de los gases bióxido de nitrógeno, (NO_2), bióxido de azufre (SO_2) y el formaldehído (HCHO) medidas en superficie durante el período 2015 a 2018.
- Los mapas de la República Mexicana con la distribución espacial promedio de NO_2 , SO_2 y HCHO para los años 2012 a 2018 en formato de imagen y matrices de datos, así como en una plataforma interactiva para su consulta del público en general.

Esta información se hace pública a través de la página web del proyecto en la siguiente URL: <http://www.epr.atmosfera.unam.mx/INECC2019/>

CONTENIDO

1. Objetivo de la asesoría	6
2. Introducción	7
3. Antecedentes	9
4. Metodología	10
4.1. Espectroscopía infrarroja por absorción solar	
4.2. Espectroscopía óptica de absorción diferencial	
4.3. Espectroscopía óptica de absorción solar directa	
4.4. Cámara UV	
5. Sitios de medición	14
5.1. Sitios de medición	
5.2. Observatorio Atmosférico CCA-UNAM	
5.3. Observatorio Atmosférico Altzomoni	
5.4. Red MAX-DOAS	
5.5. Red PANDORA	
6. Productos	20
6.1. Formatos de las columnas verticales de gases	
6.2. Serie de tiempo con los datos de columna de NO ₂	
6.3. Serie de tiempo con los datos de columna de SO ₂	
6.4. Serie de tiempo con los datos de columna de HCHO	
6.5. Mapas con la distribución espacial de gases	
7. Estudios de validación	35
7.1. Variabilidad de NO ₂ en la Ciudad de México y comparación con datos de superficie	
7.2. Comparación de productos satelitales de NO ₂ con mediciones de superficie	
7.3. Comparación de la columna de HCHO y su distribución espacial	
7.4. Variabilidad de la columna de SO ₂ y comparación con productos satelitales	
7.5. Comparación de las emisiones de SO ₂ de la pluma del volcán Popocatepetl	
8. Perspectivas a futuro	51
9. Conclusiones y recomendaciones	52
10. Referencias	53

1. Objetivo de la asesoría

El objetivo principal de este programa piloto es fortalecer las capacidades de nuestro país en cuanto a la observación atmosférica, diseñando e implementando herramientas de percepción remota desde estaciones terrenas para generar información que nos permita evaluar y validar los productos satelitales que se encuentran disponibles para la determinación de la distribución espacial de contaminantes atmosféricos. Esto es posible a través de estudios detallados de comparación con las mediciones realizadas por sistemas de monitoreo en superficie.

Con este fin, se presentan los avances en cuanto a la implementación de estas metodologías y las bases de datos que se han podido generar con las mediciones realizadas en los últimos años. Asimismo, se presentan algunos mapas con la información obtenida a partir de observaciones satelitales en la cual se demuestra la distribución espacial de ciertos contaminantes atmosféricos, como son el bióxido de nitrógeno, (NO₂), el bióxido de azufre (SO₂) y el formaldehído (HCHO).

Llegar a conocer la concentración integrada y distribución espacial y temporal de estos gases es de suma importancia para México ya que fungen como indicadores de la emisión directa en zonas industriales, urbanas y otras fuentes de gases a la atmósfera. Su presencia puede también ser producto de reacciones fotoquímicas, tal es el caso de formaldehído y de muchas otras especies químicas. Con las observaciones satelitales es posible identificar las zonas críticas del país en materia de emisión de contaminantes.

Es importante hacer la aclaración de que estas medidas de la densidad de columna vertical, que se reportan con instrumentos de percepción remota tanto desde la superficie como de plataformas satelitales, no son equivalentes a las medidas que se realizan con instrumentos *in situ* como aquellos instalados en las redes de monitoreo atmosférico. La columna vertical, normalmente reportada en unidades de moléculas/área, unidades Dobson (DU) o relación de mezcla por distancia (ppm m), es una medida de la concentración integrada de un gas a lo largo de la vertical en dirección del cenit. Por otro lado, la concentración en superficie dada en unidades de ppm (partes por millón), ppb (partes por billón) o $\mu\text{g}/\text{m}^3$, representa la concentración puntual en el sitio en la que se ubica la estación de monitoreo.

Es evidente con lo dicho anteriormente, que el objetivo de las mediciones satelitales no es reemplazar las redes de monitoreo en superficie, sino proveer de información complementaria con la que se puede conocer la distribución espacial de la calidad del aire sobre todo en donde no se realizan mediciones en superficie.

2. Introducción

La NASA (National Aeronautics and Space Administration) de los EUA tiene previsto el lanzamiento de un instrumento a bordo de un satélite en órbita geoestacionaria para monitorear la calidad del aire de manera continua en buena parte del continente Norteamericano. Para esta misión, llamada TEMPO (*Tropospheric Emissions: Monitoring of Pollution*), se ha diseñado y construido un sofisticado espectrómetro que mide la luz visible y ultravioleta reflejada por la superficie terrestre [Zoogman et al. 2017]. A diferencia de misiones anteriores en órbitas polares bajas con instrumentos similares y que solamente sobrevuelan el mismo lugar un máximo de dos veces por día, éste será el primero en contar con la capacidad de monitorear algunos contaminantes y parámetros atmosféricos, en un área que se extiende en buena parte del continente (ver Figura 1), durante el día con resolución horaria.

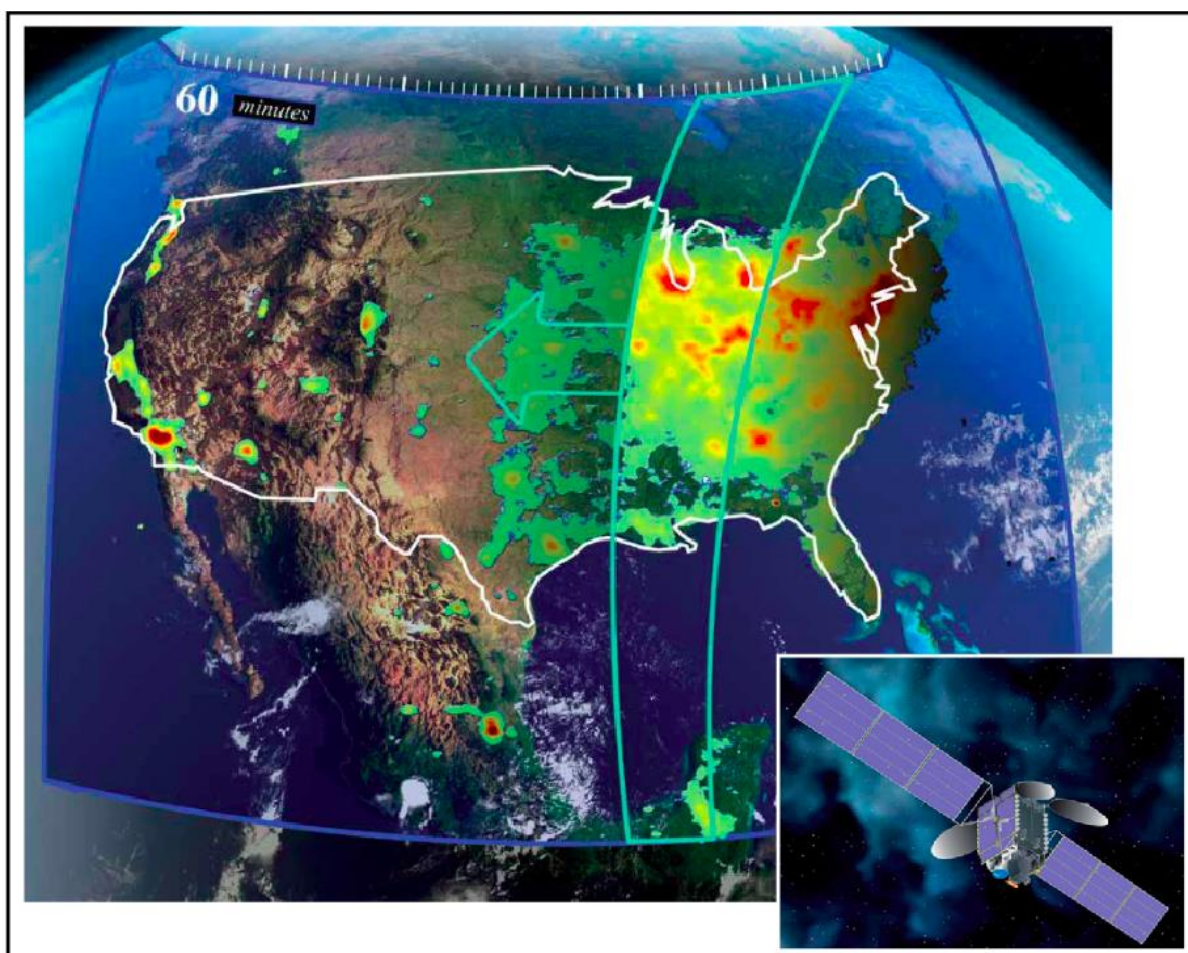


Figura 1. Esquema de medición de la misión TEMPO tomado de Chance K. Scientia 2019.

Con la información que generará TEMPO, se buscará por un lado mejorar significativamente la identificación y cuantificación de las fuentes de emisión y con esto, entre otras cosas, mejorar los inventarios de emisiones. Esta información es de enorme relevancia ya que con un conocimiento más preciso de las emisiones se pueden mejorar los pronósticos que nos proveen los modelos de

calidad del aire. En conjunto con estudios en superficie y sinergias con otros satélites, como el GOES-R, TEMPO ayudará a monitorear de mejor manera la exposición a la que está expuesta la población. Se buscará que con la información disponible, se puedan proponer estrategias más efectivas para la mitigación y control de emisiones, así como aumentar la capacidad de prevención a través de sistemas de alerta temprana en caso por ejemplo de eventos extraordinarios.

La mayor parte del tiempo, TEMPO estará realizando observaciones estándar en las que a través de barridos Este a Oeste, determinará cada hora las concentraciones de columna de gases contaminantes como son el ozono (O_3), NO_2 , SO_2 y HCHO, así como otros parámetros que ayudarán a caracterizar de forma detallada la distribución de aerosoles, nubes, cobertura vegetal y el índice de radiación ultravioleta. El resto del tiempo lo puede dedicar para hacer observaciones especiales con una resolución temporal de diez minutos o mejor, para captar eventos particulares como incendios, erupciones volcánicas, tormentas de polvo, etc. Las aplicaciones son muy amplias, pero sólo para destacar algunas, la medición de la fluorescencia de la clorofila inducida por el Sol es un indicador de la producción primaria. Los mapas de este parámetro con resolución horaria van a mejorar sustancialmente el conocimiento que tenemos actualmente del ciclo de carbono en diferentes regiones a través de sus periodos de captura, respuestas a sequías, etc. Sobre el océano, por ejemplo, se podrán detectar las mareas rojas y realizar estudios sobre la dinámica del fitoplancton [Chance et al. 2019].

El instrumento TEMPO ha sido construido en su totalidad por la empresa *Ball Aerospace Corp.* y se encuentra resguardado. Según una nota reciente¹, pronto el instrumento será enviado a *Maxar Technologies of Westminster*, quienes integrarán el instrumento a una de sus plataformas satelitales de la serie 1300 y estarán encargados además de gestionar el lanzamiento en una nave *Falcon 9* de la empresa *SpaceX*, de proveer los servicios de transmisión de los datos. El lanzamiento y puesta en órbita del instrumento está prevista para principios del 2022.

¹ <https://www.cfa.harvard.edu/news/2019-15>

3. Antecedentes

Existen misiones espaciales a nivel internacional dedicadas al estudio de gases contaminantes y varios instrumentos de este tipo ya se encuentran orbitando y monitoreando el planeta. Como ejemplo podemos mencionar algunos como el *Ozone Monitoring Instrument* ([OMI](#)) a bordo del satélite Aura de la NASA, por parte de la ESA el *Infrared Atmospheric Sounding Interferometer* ([IASI](#)) a bordo del MetOp y el *Tropospheric Monitoring Instrument* ([TROPOMI](#)) a bordo del Sentinel-5P, así como los instrumentos SCHIAMACHY y el MIPAS a bordo del Envisat. Éste último satélite orbitó el planeta recolectando valiosos datos durante diez años, y en el 2012 finalmente se perdió la comunicación. Así como unas misiones mueren, otras de mayor capacidad están apenas siendo diseñadas o en planes de ser lanzadas en fechas próximas. Tanto el OMI como el TROPOMI continúan su operación y generan información muy valiosa, aunque en el mejor de los casos, se cuenta con una sola medición por día y la resolución espacial deja mucho que desear.

En el grupo de Espectroscopía y Percepción Remota del Centro de Ciencias de la Atmósfera de la UNAM (CCA-UNAM) se ha trabajado en montar la infraestructura en estaciones terrenas para, entre otras cosas, llevar a cabo la validación de productos satelitales. Se han reforzado las capacidades de medición en los dos observatorios atmosféricos de la UNAM, el de Ciudad Universitaria instalado en la azotea del CCA-UNAM y el de Alzomoni, que es una estación de altura ubicada en el Parque Nacional Izta-Popo a 4,000 m sobre el nivel del mar. En estos sitios se cuenta con espectrómetros infrarrojos FTIR (sección 4.1) altamente sofisticados para la detección de gases a lo largo de toda la columna vertical de la atmósfera. Estas mediciones ya han sido empleadas para generar mapas de monóxido de carbono (CO) [Stremme et al. 2013] y del NO₂ [Rivera et al. 2013] en el centro de México. Igualmente, se ha iniciado con la operación de una [red de MAX-DOAS](#) (sección 5.3) con instrumentos en diferentes puntos dentro y fuera de la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM), con la capacidad de medir las columnas verticales de otros gases relevantes para la evaluación de la contaminación. Más recientemente, la UNAM a través de un proyecto sectorial con la Agencia Espacial Mexicana (Conacyt-AEM) y el INECC, se adquirieron fotoradiómetros espectrales robotizados con los que se está conformando una nueva [red mexicana de PANDORA](#) para validación satelital.

En este proyecto, se reportan las mediciones con estos sensores remotos para la determinación del NO₂, SO₂ y HCHO. Los resultados o series de tiempo obtenidas en estas estaciones terrenas han sido integradas en bases de datos que forman parte de los productos de este informe. La validación e integración de esta gran cantidad de datos junto con las observaciones satelitales nos da la posibilidad de generar mapas de la concentración integrada de estos gases. Esta información es de enorme utilidad en la evaluación de emisiones de gases a la atmósfera por región o sector ya que se pueden identificar y cuantificar las ciudades y los

centros industriales involucrados, así como otras fuentes por eventos extraordinarios como son los incendios forestales y las emisiones volcánicas.

4. Metodologías

4.1. Espectroscopía infrarroja de absorción solar

La espectroscopía infrarroja de absorción solar es una valiosa técnica de percepción remota que proporciona información sobre la columna total y la distribución vertical de varios gases que componen nuestra atmósfera. Con esta técnica es posible monitorear el cambio de la composición de la atmósfera debido a que con una sola medición del espectro solar, se pueden determinar simultáneamente una gran variedad de gases. Esta técnica consiste en la medición del espectro de absorción solar en el infrarrojo del cual, mediante el análisis de las líneas de absorción de cada gas, se puede obtener la información vertical deseada. Para obtener los espectros de absorción solar se utilizan espectrómetros de tipo FTIR (*Fourier Transform InfraRed spectrometer*). En esencia, un FTIR consta principalmente de un interferómetro de *Michelson*, una fuente de luz y un detector. El interferómetro es un dispositivo que aprovecha la interferencia de las ondas luminosas para medir longitudes de onda de la luz misma. La fuente de luz que se utiliza en la espectroscopía de absorción solar es el Sol y en este caso la atmósfera actúa como la muestra. Finalmente, el detector es el dispositivo que permite el registro de la señal en el rango del infrarrojo dando origen a un interferograma que posteriormente se traduce a un espectro de radiación solar.

El espectro de radiación solar que llega a la superficie de la atmósfera terrestre es bien conocido. Cuando la luz solar pasa a través de la atmósfera, parte de esta luz es absorbida por los gases de la misma. La absorción es específica para cada gas. Por lo tanto, las líneas del espectro de radiación solar después de que la radiación ha pasado por la atmósfera contienen información sobre: las especies presentes en la atmósfera, la cantidad de cada gas (relación entre la profundidad de las líneas de absorción y el área) y la distribución de estas moléculas de acuerdo a la altitud (forma de las líneas de absorción).

Los gases se pueden detectar con la espectroscopía de absorción solar debido a las transiciones vibracionales y rotacionales que presentan estas moléculas como consecuencia de la interacción de ellas con la radiación, originado de esta forma el espectro rotación-vibración de la molécula. Cada especie tiene un patrón de transiciones que da origen a un espectro característico el cual depende de las propiedades físicas y de la estructura de la molécula. La posibilidad de medir trazas de gases en la atmósfera se debe al hecho de que los principales gases que la componen (nitrógeno N_2 , oxígeno O_2 y argón Ar) no tienen momento dipolar y no son activos en el infrarrojo. Una gran variedad de gases, incluyendo al bióxido

de nitrógeno (NO_2), bióxido de azufre (SO_2) y el formaldehído (HCHO) se pueden medir con esta técnica gracias al espectro característico en el infrarrojo que presentan estas especies.

Para registrar los espectros de absorción solar en los Observatorios Atmosféricos de la UNAM y en ALTZOMONI, se utilizan espectrómetros FTIR. El instrumento en la UNAM, Ciudad Universitaria, es de resolución espectral moderada (modelo Vertex 80, marca Bruker) y el de Altzomoni, ubicado en el parque nacional Izta-Popo, es de alta resolución espectral (modelo IFS 120/5 HR, del mismo fabricante Bruker), ambos diseñados para la adquisición de datos en el infrarrojo medio y cercano. El instrumento en la UNAM opera desde el año 2009 y el de Altzomoni fue traído a México en marzo del 2012 como parte de una colaboración con el Instituto de Karlsruhe de Tecnología (KIT) de Alemania.

Ambos instrumentos están equipados con un rastreador solar, que es un dispositivo con componentes ópticos y electromecánicos diseñados para seguir de manera automatizada el movimiento del Sol. Esto es importante para que la radiación esté dirigida continuamente hacia la entrada del espectrómetro a lo largo del día (mientras no esté nublado) y se puedan registrar los espectros infrarrojos.

Para el análisis de espectros se utiliza el código PROFITT, que ha sido desarrollado para realizar la recuperación de los gases traza (obtención de la concentración del gas) a partir del espectro de absorción solar [Hase et al., 2004]. En esencia, se calcula un espectro sintético empleando un modelo directo con la base de datos espectroscópicos HITRAN (High resolution TRANsmision) de cada molécula presente en la atmósfera. El algoritmo se encarga de calcular el espectro sintético, compararlo con el espectro medido, y ajustarlo iterativamente hasta obtener un resultado óptimo de concentración (mínimo residual con respecto a la medición) en cada capa. La columna vertical total se obtiene a partir de la suma de las concentraciones en cada una de estas capas.

4.2. Espectroscopía óptica de absorción diferencial pasiva

La espectroscopía óptica de absorción diferencial en ejes múltiples, o MAX-DOAS por sus siglas en inglés (*Multi-AXis Differential Optical Absorption Spectroscopy*), es una técnica de percepción remota que se basa en la interacción de la luz solar indirecta con la materia descrita por la ley de Lambert-Beer [Platt y Stutz 2008]. Este método ha sido utilizado ampliamente durante décadas pasadas y es capaz de cuantificar las columnas atmosféricas de varias moléculas simultáneamente, proveer resultados en tiempo real y con buena resolución en tiempo. Adicionalmente, la técnica de medición no es invasiva, es precisa y con flexibilidad suficiente para ser utilizada en diferentes condiciones y ambientes.

La técnica está basada en la medición de la luz solar esparcida por la atmósfera. Se colectan espectros UV/visibles del cielo en diferentes ángulos de elevación mediante un telescopio montado sobre una caja motorizada que realiza el barrido. En los equipos que operamos, una fibra óptica dirige la radiación colectada hacia un espectrómetro de rejilla (modelo USB2000+ de la marca Ocean Optics), el cual registra el espectro en una computadora. En Arellano et al. [2016] se describe de manera detallada el diseño y funcionalidad de estos instrumentos. En la UNAM se construyeron 6 equipos MAX-DOAS a partir del año 2012 con recursos propios del grupo y con apoyo de la Secretaría del Medio Ambiente del Gobierno de la Ciudad de México (SEDEMA). El análisis de las columnas inclinadas se realiza mediante el software QDOAS y se convierten a columnas verticales a través de un código basado en un modelo de transferencia de radiación VLIDORT [Spurr 2001] y la inversión de los datos medidos usando estimación óptima [Rodgers 1976]. Friedrich et al. [2018] hacen una descripción completa del código MMF desarrollado para recuperar la concentración integrada de los gases detectados con esta técnica.

4.3. Espectroscopía óptica de absorción solar directa

Los instrumentos PANDORA son unos foto-radiómetros hiperespectrales diseñados originalmente por la NASA para la validación de datos satelitales como los que se generan a partir de las misiones GOME-2 y OMI. Actualmente estos instrumentos son comercializados por la empresa SciGlob, y tienen la característica de contar con un diseño estandarizado para que los datos puedan ser incluidos en una red global (www.pandonia.net) y analizados con métodos trazables e intercomparables.

Los equipos PANDORA miden la luz directa del Sol utilizando un cabezal telescópico equipado con un seguidor solar, el cual concentra la radiación a una fibra óptica y la introduce a un espectrómetro (Avantes) para su descomposición espectral. El espectrómetro cuenta con un sistema de control de temperatura y una CCD (*Charged Coupled Device*) para el registro del espectro en el rango UV/Visible. El cabezal está equipado con dos discos giratorios para poder medir espectros oscuros, con 3 distintos filtros de interferencia y opacos, así como para medir sin filtro. El PANDORA puede medir la radiancia espectral tanto de la luz solar (con filtros) como de la luna (sin filtros).

El instrumento opera de manera automática, siguiendo una rutina para la optimización de la alineación del instrumento, en la cual se hacen barridos verticales (cénit) y horizontales (acimut) del disco solar (o lunar) para encontrar el centro, la medición secuencial utilizando los diferentes filtros, así como barridos del cielo en un eje específico como lo hace el MAX-DOAS.

La calibración de los instrumentos es realizada tanto en los laboratorios de la NASA (Goddard Space Flight Center) como en los de la empresa LuftBlick en Austria. Ésta está encargada de mantener un registro de la calidad de las calibraciones de todos los instrumentos que pertenecen a la red. La UNAM adquirió 4 equipos a través de un proyecto sectorial Conacyt-AEM (Agencia Espacial Mexicana), tres de los cuales están operando: uno en la azotea del CCA-UNAM en Ciudad Universitaria, otro en el laboratorio de Análisis Atmosférico (LAA) de la Secretaría de Medio Ambiente (SEDEMA) en Vallejo y el tercero opera desde la estación de altura de Altzomoni. Uno más ha sido adquirido por el INECC en el 2019 y está instalado en una Unidad Móvil y el último a la fecha de la elaboración de este informe no había sido instalado aún. La información es enviada y almacenada en un repositorio internacional de la [red de PANDORAS](#)², y procesada tanto a nivel local como en la central de LuftBlick. México ya contribuye a esta red con datos de dos estaciones bajo la política de datos abiertos.

4.4. Cámara UV

La cámara UV (ultravioleta) es un instrumento de percepción remota utilizado hace varios años para el monitoreo de SO₂ que permite, mediante la captura de imágenes en diferentes rangos espectrales, la identificación de este gas con información cuantitativa y espacial alrededor de su fuente de emisión [Bluth et al., 2007].

Este dispositivo utiliza la radiación solar esparcida en la atmósfera como fuente de luz para las mediciones. Originalmente fue desarrollada para medición de bióxido de azufre a partir de fuentes industriales. Solo recientemente los detectores basados en CCD (*Charged Coupled Device*) bidimensionales hicieron posible el diseño de instrumentos pequeños y ligeros para producir imágenes en dos dimensiones para obtener la distribución de este gas contaminante en la pluma volcánica. Los instrumentos hacen uso de la absorción selectiva de la luz UV por las moléculas de SO₂ para determinar la concentración integrada a lo largo del paso de luz.

La cámara UV tiene muchas ventajas, incluyendo la capacidad de medir una imagen en segundos, de recuperar de la densidad de la columna de SO₂ en cada medición con una relación señal/ruido bastante alta y con la posibilidad de utilizar esta técnica con plumas diluidas o poco concentradas [Dalton et al., 2009]. El desarrollo de esta técnica permite mejorar el conocimiento sobre las dinámicas eruptivas y monitorear cambios en la desgasificación pasiva del SO₂, lo que resulta un importante indicador de la variabilidad del sistema volcánico y de la actividad eruptiva. Las cámaras UV se están utilizando cada vez más para medir la

² <https://www.pandonia-global-network.org>

distribución bidimensional de dióxido de azufre en plantas de generación eléctrica y plumas volcánicas [Kern et al., 2010a, Dalton et al. 2009].

En el Observatorio Alzomoni se cuenta con una cámara UV para monitorear las emisiones de SO₂ del volcán Popocatépetl. Se trata de una cámara QSI (Quantum Scientific Imaging), modelo RS 1.6 con una CCD sensible en el UV y un objetivo con una lente Edmund Optics y diferentes filtros de paso-banda. Este dispositivo permite registrar una vista bidimensional de la pluma de SO₂ para el estudio más detallado de la dinámica y velocidad de la pluma, por contar con una alta frecuencia temporal y alta resolución espacial. Estas últimas representan las ventajas de este instrumento, las desventajas incluyen las incertidumbres dominadas por el efecto de dilución de la luz por partículas y el uso de filtros con una específica longitud de onda.

Para las mediciones que realizamos ya de manera operativa desde Alzomoni utilizamos una lente con distancia focal de 50 mm. Originariamente, compramos dos lentes una de 50 mm y un de 90 mm, pero debido a la distancia del instrumento hacia al cráter decidimos utilizar la lente con distancia focal de 50 mm para ampliar el campo de visión y así poder alcanzar una mejor vista de la pluma volcánica. Para el análisis se usan los filtros pasa-banda de 300, 307 y 310 nm en el rango de absorción del bióxido de azufre, y el de 330 nm para el rango en donde este gas no absorbe la radiación de fondo [Schiavo, B. Tesis de Doctorado, 2019].

5. Sitios de medición

Los estudios y mediciones para la validación de datos satelitales se han realizado exclusivamente en la zona del centro de México, aunque en el grupo de trabajo ya se está planeado la instalación de equipos en otras partes del territorio mexicano. En el mapa de la Figura 2 se presentan en rojo las ubicaciones de los observatorios atmosféricos UNAM, Vallejo y Alzomoni equipados con espectrómetros FTIR, también pertenecientes a la Red Universitaria de Observatorios Atmosféricos (RUOA³). Por otro lado, con puntos azules (incluyendo UNAM y Vallejo) se presentan las ubicaciones que conforman la red de equipos MAX-DOAS.

³ <https://www.ruoa.unam.mx>

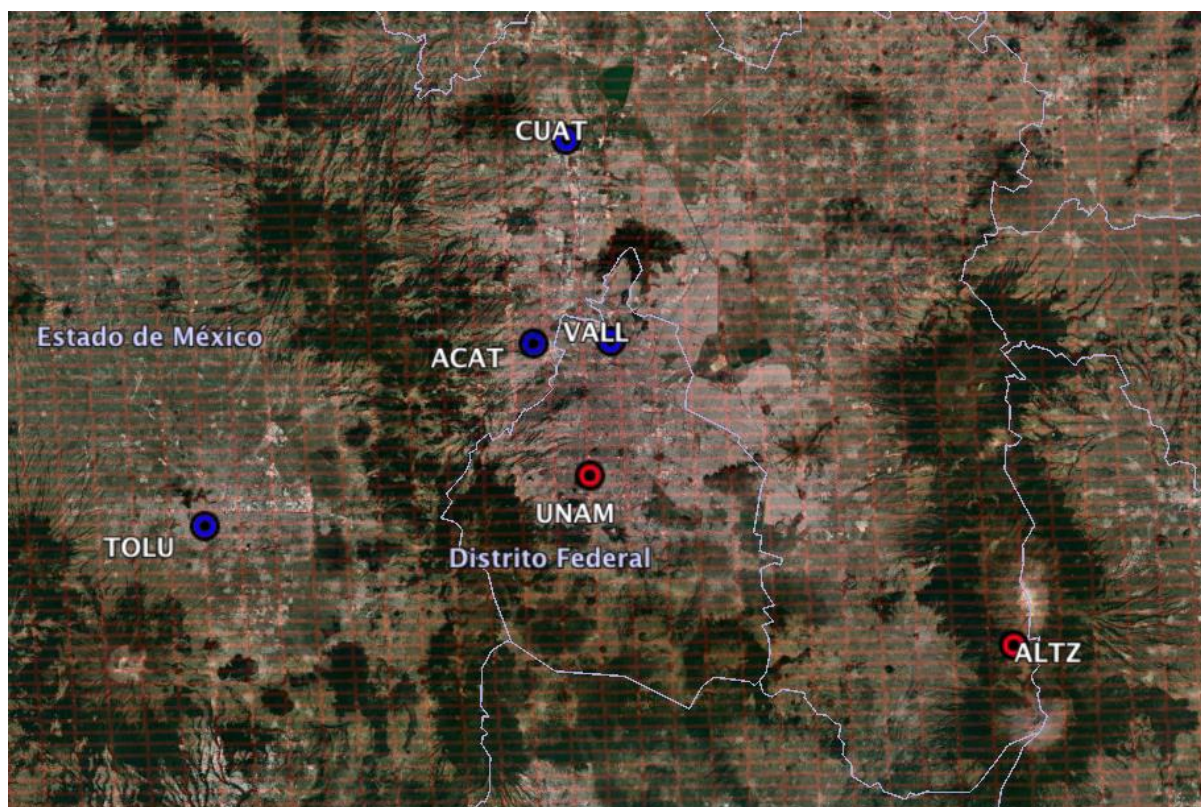


Figura 2. Mapa de la Zona Metropolitana del Valle de México indicando los sitios de medición para la validación satelital. La cuadrícula representa la resolución espacial, a través de los tamaños de pixel, con los que se va a medir TEMPO la distribución de la contaminación en el centro de México.

5.1. CCA-UNAM

El Observatorio Atmosférico de la UNAM, que se encuentra ubicado en la azotea del CCA-UNAM de Ciudad Universitaria en la Ciudad de México, pertenece a la Red Universitaria de Observatorios Atmosféricos ([RUOA](#)) y es la plataforma de medición atmosférica más completa del país. Cuenta con instrumentación para la medición de parámetros meteorológicos, analizadores de calidad del aire (estación CCA operada y parte de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico de la SEDEMA-CDMX), analizadores de gases de efecto invernadero, carbono negro, colectores de depósito húmedo y seco, partículas aerobiológicas, perfilador de viento, perfilador de aerosoles e instrumentación altamente sofisticada para determinar en línea la composición de partículas finas, entre otros.

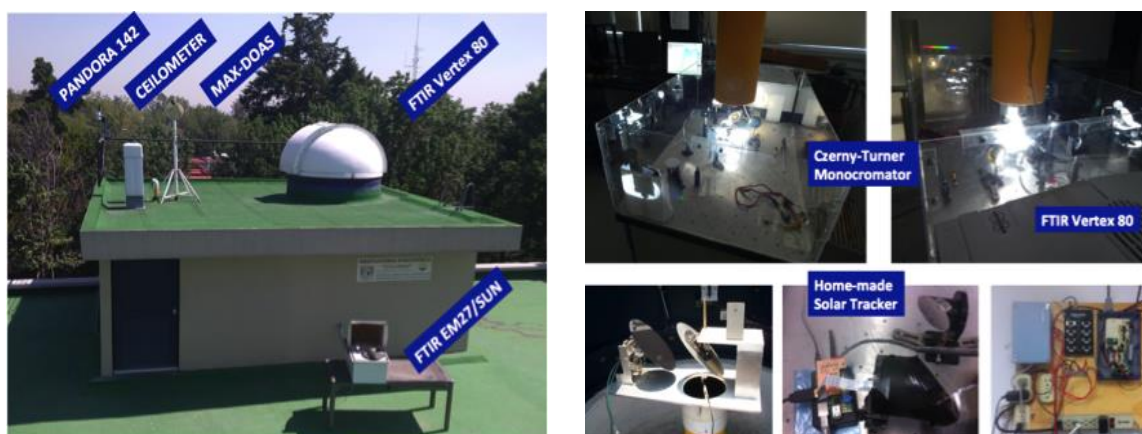


Figura 3. Infraestructura para la medición de las concentraciones de columna vertical de varios compuestos atmosféricos en el Observatorio Atmosférico de la UNAM, sobre la azotea del Centro de Ciencias de la Atmósfera en la Ciudad de México.

Además, como se aprecia en la Figura 3, en el grupo operamos equipos de percepción remota para la caracterización de la composición gaseosa en la columna vertical. Se cuenta con dos espectrómetros FTIR (Bruker Vertex 80 y EM27/SUN) acoplados a seguidores solares, un MAX-DOAS y un espectroradiómetro PANDORA.

5.2. Altzomoni

La estación de altura de Altzomoni, que se encuentra a una altura de 4,000 m s.n.m. en el Parque Nacional Izta-Popo, contribuye con datos para la [red internacional NDACC](#) (*Network for the Detection of Atmospheric Composition Change*). El FTIR que se opera ahí de manera remota (se cuenta con conexión de banda ancha via microondas) es un espectrómetro de alta resolución (Bruker IFS HR120/5) acoplado a un seguidor solar. Las mediciones espectrales de la radiación directa del Sol se realizan en los días cuando las condiciones meteorológicas lo permiten. Los espectros registrados nos permiten analizar la densidad de columna en la vertical de gases de interés para el estudio de la química de la estratósfera (O_3 , HNO_3 , HCl , HF , CFC's, HCFC's, etc.) así como compuestos de origen troposférico (CH_4 , $HCHO$, SO_2 , N_2O , CO , C_2H_6 , etc.). También se cuenta con un DOAS para la medición de la luz directa del Sol y en el 2018 se iniciaron las mediciones con el instrumento PANDORA.



Figura 4. Infraestructura para la medición de las concentraciones de columna vertical de varios compuestos atmosféricos en el Observatorio Atmosférico de Alzomoni, ubicado a 4,000 m s.n.m. en el Parque Nacional Izta-Popo.

5.3. Red MAX-DOAS

En el año 2013, nuestro grupo empezó con el diseño y construcción de los instrumentos para integrar la [red de MAX-DOAS](#). En el diseño se contempló un instrumento que estuviera lo suficientemente automatizado para operar con una mínima asistencia. Tanto las especificaciones como la conformación de la red con las características de cada estación se describen detalladamente en Arellano et al. [2016].

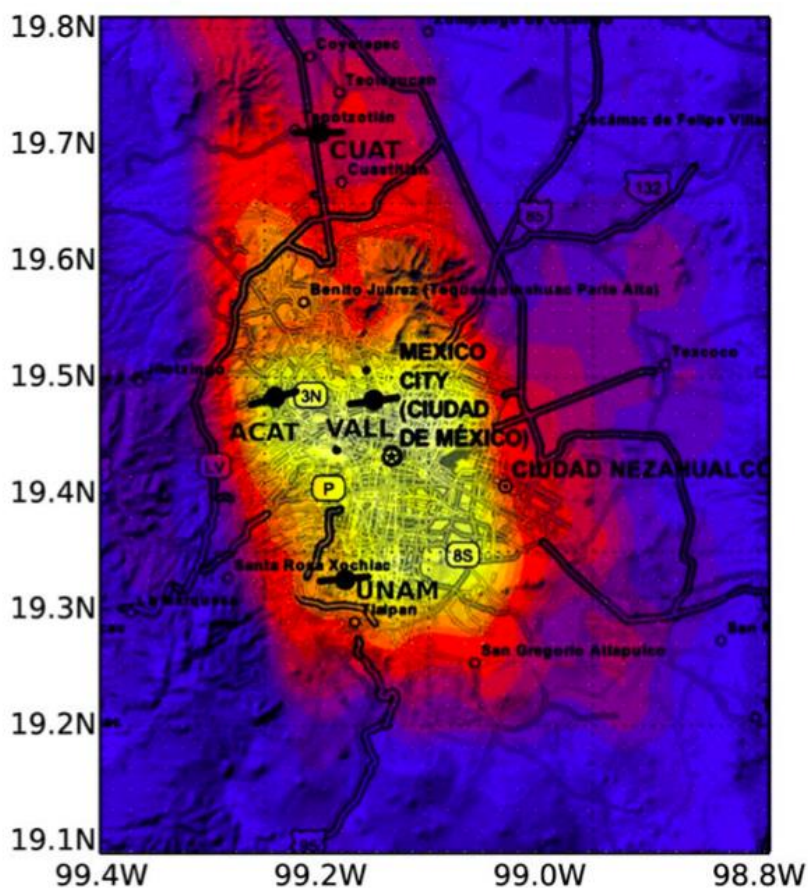


Figura 5. Mapa de la ZMVM con las ubicaciones de las estaciones con instrumentos MAX-DOAS. La distribución relativa promedio de NO_2 se presenta con la escala de colores. Ver [Arellano et al. 2016].

Durante la ejecución de este proyecto, se continuaron las mediciones con MAX-DOAS en estaciones de la RAMA dentro de la ZMVM en Cuautitlán, FES-Acatlán y Vallejo (Centro 5).

Tabla 1. Ubicación de las estaciones en las que se operan instrumentos MAX-DOAS

ID	Location	Latitude	Longitude	Altitude (m)
UNAM	Ciudad Universitaria, CdMx	19.326	-99.176	2,280
ACAT	FES Acatlán, CdMx	19.482	-99.243	2,299
VALL	Centro 5 Vallejo, CdMx	19.483	-99.147	2,255
CUAT	Parque Xochitla Cuautitlán, CdMx	19.722	-99.198	2,263
JQRO	Juriquilla, Querétaro	20.703	-100.447	1,945
TOLU	Toluca Centro, Edo Mex.	19.274	-99.657	?

5.4. Red PANDORA

Los instrumentos PANDORA (SciGlob Instrument and Services LLC) son unos espectrofotómetros diseñados para medir continuamente la radiación solar directa. Está compuesto de un cabezal cuyo propósito es coleccionar y enfocar la radiación del Sol en la entrada de una fibra óptica. Dentro del cabezal se encuentran dos ruedas de filtros motorizadas para seleccionar el rango espectral a ser guiado hacia la unidad del espectrómetro, que se encuentra ya sea dentro de una caseta o edificio, o en un compartimiento de intemperie. El cabezal está montado sobre un seguidor solar para asegurar que la mira telescópica apunte continuamente hacia el Sol. Además de registrar espectros solares de luz directa, el instrumento puede ser programado para hacer barridos del cielo de manera similar al MAX-DOAS.

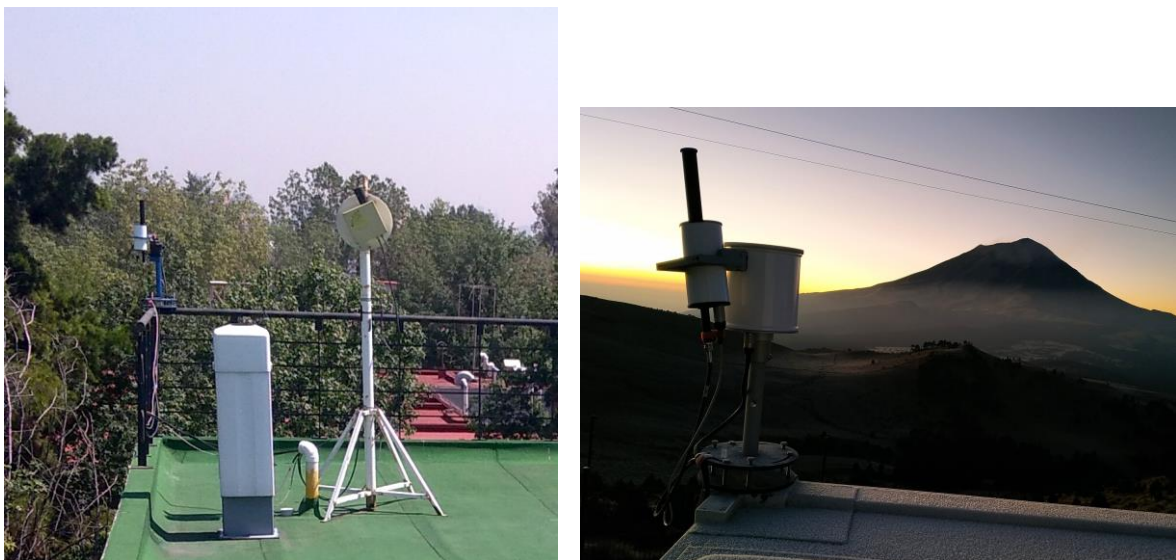


Figura 6. Instrumentos PANDORA instalados en la azotea del CCA-UNAM (izquierda) y en el observatorio atmosférico de Alzomoni (derecha).

La UNAM ha adquirido cuatro de estos instrumentos para iniciar con la conformación de la [red mexicana de PANDORAS](#). Adicionalmente, el INECC ha adquirido un instrumento más que actualmente está instalado en una Unidad Móvil junto con otros equipos de percepción remota, como es un LIDAR-Doppler y un radiómetro para estudiar la distribución vertical del viento y la temperatura.

Tabla 2. Ubicación de las estaciones en las que se operan instrumentos

ID	Location	Latitude	Longitude	Altitude (m)
P65	Altzomoni Atmospheric Observatory	19.119	-98.655	3.985
P142	UNAM, Ciudad Universitaria, CdMx	19.326	-99.176	2,280
P157	VALL, Centro 5. Vallejo. CdMx	19.483	-99.147	2,255
P141	Not yet installed	--	--	--
P151	INECC Mobile Laboratory	--	--	--

PANDORA

6. Productos

En esta sección se describen los formatos de los datos contenidos en los productos digitales de columnas atmosféricas entregados. También se incluyen los gráficos de las series de tiempo de los compuestos atmosféricos medidas con las metodologías descritas en la sección 4 y se muestran ejemplos de los mapas generados con la distribución promedio de NO₂, SO₂ y HCHO a partir de observaciones satelitales, disponibles también en la plataforma interactiva de [UNIATMOS](#).

6.1. Formatos de las columnas verticales de gases

6.1.1. El formato HDF (*Hierarchical Data Format*)

El formato en el que se presentan los datos de columnas verticales es un formato de datos jerárquico (HDF, por sus siglas en inglés) el cual ha sido diseñado para almacenar una gran cantidad de datos de una forma simplificada y con sus respectivos metadatos. Este formato es soportado (y puede ser leído) por varias plataformas de software comerciales y no comerciales, incluyendo *Java*, *MATLAB*, *Scilab*, *Octave*, *OCaml*, *Mathematica*, *IDL*, *Python*, *R*, *Fortran* y *Julia*. El software libre HDFView⁴ es recomendado por la simplicidad en su uso, permite al usuario abrir los archivos, revisar los datos así como realizar gráficas sencillas.

Todas las columnas de gases medidas con los equipos MAX-DOAS y FTIR se presentan con el mismo formato, el cual es un formato estandarizado y ampliamente utilizado por la comunidad científica internacional.

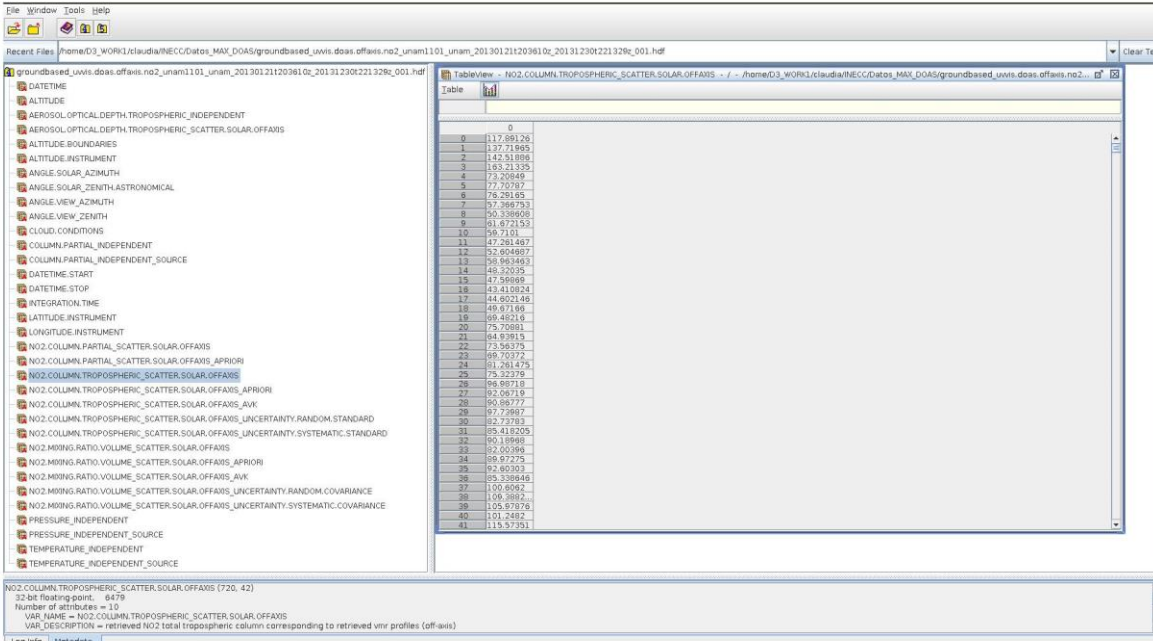
⁴ Descargable en: <https://portal.hdfgroup.org/display/support/Download+HDFView>

6.1.2. Columnas de gases medidas con los equipos MAX-DOAS

Los archivos que contienen las columnas de gases medidas con los equipos MAX-DOAS están nombrados específicamente para cada gas de interés. Para el caso de NO₂ un archivo que contiene datos del año 2015 de la estación UNAM se presenta en la Figura 7 y es nombrado de la siguiente forma:

groundbased_uvvis.doas.offaxis.no2_unam1101_unam_20150113t194339z_20151229t235100z_001.hdf

En este caso se indica el tipo de medición (uvvis.doas.offaxis), el gas de interés (no2), la institución (unam), el código del equipo (1101), el nombre de la estación (unam), la fecha (YYYYMMDD) y hora (HHMMSS) de inicio (20150113t194339z) así como la fecha y hora de término (20151229t235100z) de las mediciones. Cabe mencionar que la hora se presenta en tiempo medio de Greenwich (GMT). La columna de NO₂ se encuentra en el campo NO2.COLUMN.TROPOSPHERIC_SCATTER.SOLAR.OFFAXIS y sus unidades son P molec/cm² (P = 10¹⁵).



The screenshot shows a software interface with a list of variables on the left and a table of values on the right. The variable selected is NO2.COLUMN.TROPOSPHERIC_SCATTER.SOLAR.OFFAXIS. The table displays 81 rows of data, with the first row having a value of 0 and the last row having a value of 115.97351.

Index	Value
0	0
1	117.88126
2	137.71885
3	142.51888
4	153.21355
5	173.20849
6	177.70787
7	179.79185
8	177.388753
9	165.338908
10	161.872153
11	158.71101
12	147.261487
13	132.604987
14	108.953493
15	48.32035
16	17.58888
17	43.410824
18	44.602148
19	48.87168
20	68.46216
21	75.70851
22	84.83915
23	73.58375
24	68.75772
25	61.261475
26	73.23279
27	68.88718
28	62.68718
29	50.88777
30	67.72887
31	62.73783
32	65.418205
33	61.19988
34	52.60398
35	69.97275
36	62.46303
37	63.38848
38	100.8982
39	106.8882
40	105.87878
41	101.2482
42	115.97351

Figura 7. Ejemplo de archivo que contiene datos de NO₂ en el año 2015 de un equipo MAX-DOAS localizado en la estación UNAM.

Para el caso de HCHO, un archivo que contiene los datos del mismo año y misma estación se presenta en la Figura 8 y es nombrado de la siguiente forma:

groundbased_uvvis.doas.offaxis.ch2o_unam1101_unam_20150113t194339z_20151230t232749z_001.hdf

En este caso se indica el tipo de medición (uvvis.doas.offaxis), el gas de interés (ch2o), la institución (unam), el código del equipo (1101), el nombre de la estación (unam), la fecha (YYYYMMDD) y hora (HHMMSS) de inicio (20150113t194339z) así

como la fecha y hora de término (20151230t232749z) de las mediciones. Cabe mencionar que la hora se presenta en tiempo medio de Greenwich (GMT). La columna de HCHO se encuentra en el campo CH2O.COLUMN.TROPOSPHERIC_SCATTER.SOLAR.OFFAXIS y sus unidades son P molec/cm² (P = 10¹⁵).

Table View - CH2O.COLUMN.TROPOSPHERIC_SCATTER.SOLAR.OFFAXIS

Table	
0	0
1	43.47971
2	40.750412
3	22.89818
4	22.86793
5	26.638525
6	27.30074
7	54.8906
8	22.896079
9	15.234264
10	23.72988
11	24.88977
12	41.84127
13	34.092432
14	33.21601
15	47.079723
16	36.77299
17	40.68898
18	26.131313
19	36.77370
20	16.216504
21	44.89526
22	60.44368
23	33.898482
24	37.889597
25	27.896491
26	25.214482
27	46.892118
28	45.330074
29	23.842513
30	37.897407
31	37.892456
32	49.77268
33	31.761888
34	26.343174
35	38.820213
36	45.72227
37	38.880916

VAR_NAME = CH2O.COLUMN.TROPOSPHERIC_SCATTER.SOLAR.OFFAXIS
 VAR_DESCRIPTION = retrieved CH2O total tropospheric column corresponding to retrieved vvir profiles (off-axis)
 VAR_SIZE = 6500
 VAR_DEPEND = DATETIME
 VAR_DATA_TYPE = REAL
 VAR_UNITS = Pmolec cm-2
 VAR_SI_CONVERSION = 0.0186034E-5/mol m-2
 VAR_VALID_MIN = -100.0
 VAR_VALID_MAX = 1000.0
 VAR_NULL_VALUE = 999999.0

Figura 8. Ejemplo de archivo que contiene datos de HCHO en el año 2015 de un equipo MAX-DOAS localizado en la estación UNAM.

6.1.3. Columnas de gases medidos con FTIR

Los archivos que contienen las columnas de gases medidas con los equipos FTIR están nombrados específicamente para cada gas de interés. Para el caso de HCHO un archivo que contiene datos de la estación UNAM se presenta en la Figura 9 y es nombrado de la siguiente forma:

groundbased_ftir.ch2o_unam002_unamcca_20130114t184446z_20190503t155515z_001.hdf

En este caso se indica el tipo de medición (ftir), el gas de interés (ch2o), la institución (unam), el código del equipo (002), el nombre de la estación (unamcca), la fecha (YYYYMMDD) y hora (HHMMSS) de inicio (20130114t184446z) así como la fecha y hora de término (20190503t155515z) de las mediciones. Cabe mencionar que la hora se presenta en tiempo medio de Greenwich (GMT). La columna de HCHO se encuentra en el campo CH2O.COLUMN_ABSORPTION.SOLAR y sus unidades son E molec/cm² (P = 10¹⁸).

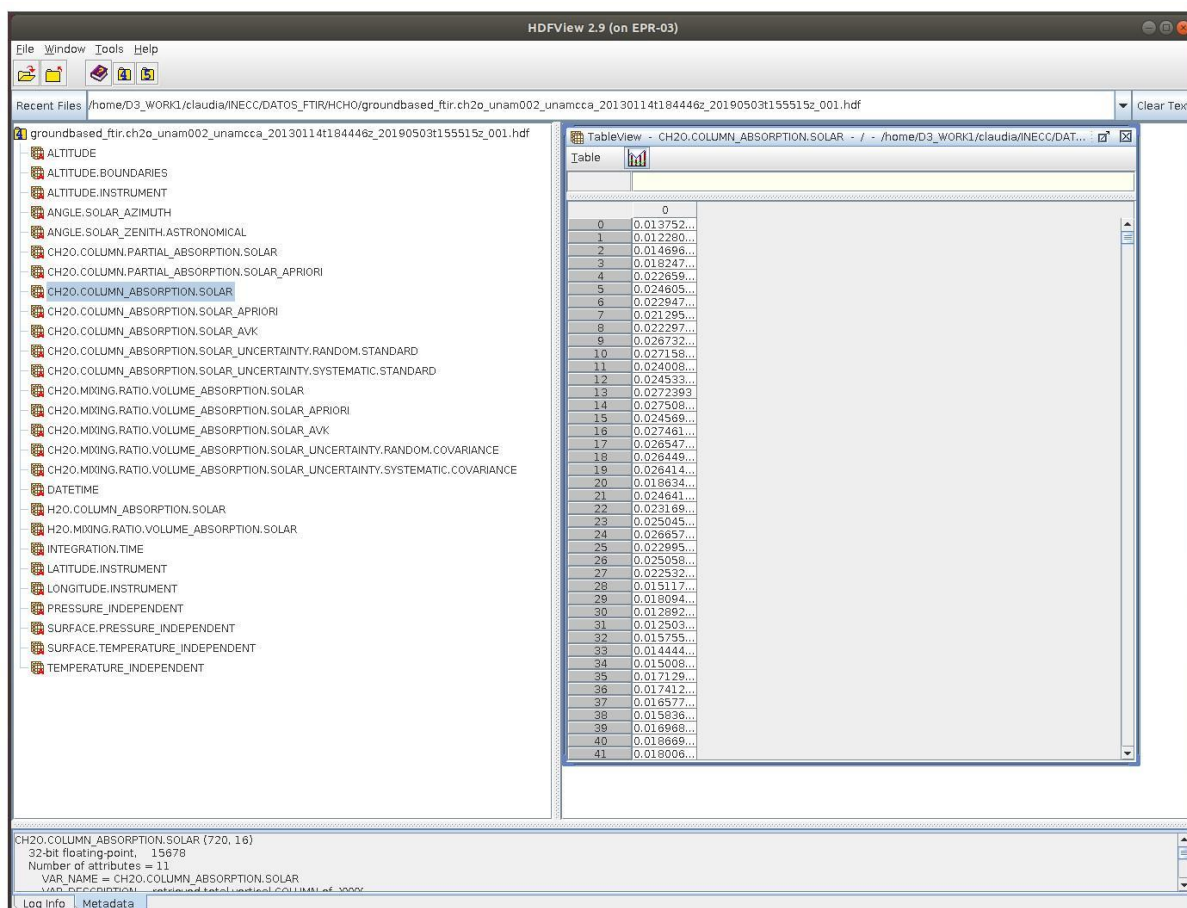


Figura 9. Ejemplo de archivo que contiene datos de HCHO de los años 2013 al 2018 de un equipo FTIR localizado en la estación UNAM.

Para el caso de SO₂ un archivo que contiene datos de la estación UNAM se presenta en la Figura 10 y es nombrado de la siguiente forma:

`groundbased_ftir.so2_unam002_unamcca_20121112t183259z_20190506t184939z_001.hdf`

En este caso se indica el tipo de medición (ftir), el gas de interés (so2), la institución (unam), el código del equipo (002), el nombre de la estación (unamcca), la fecha (YYYYMMDD) y hora (HHMMSS) de inicio (20121112t183259z) así como la fecha y hora de término (20190506t184939z) de las mediciones. Cabe mencionar que la hora se presenta en tiempo medio de Greenwich (GMT). La columna de SO₂ se encuentra en el campo `SO2.COLUMN_ABSORPTION.SOLAR` y sus unidades son E molec/cm² ($P = 10^{18}$).

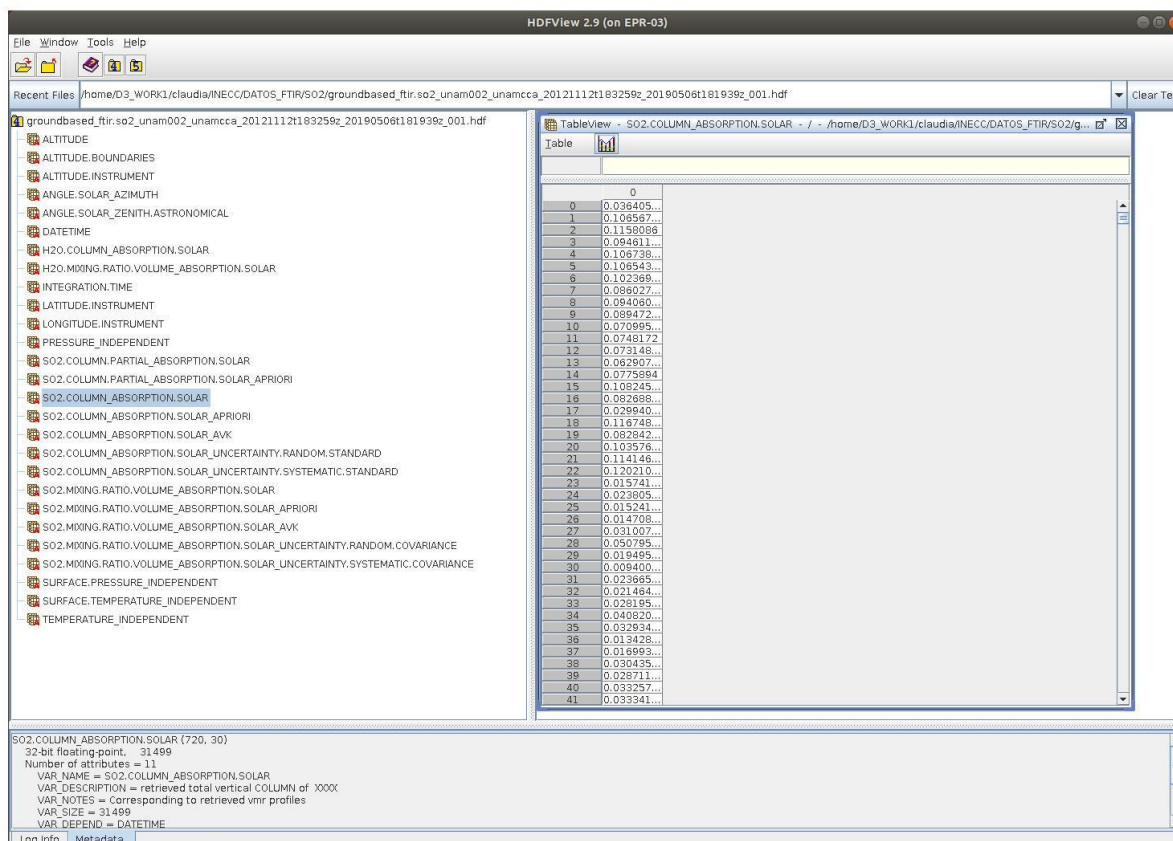


Figura 10. Ejemplo de archivo que contiene datos de SO₂ de los años 2012 al 2018 de un equipo FTIR localizado en la estación UNAM.

6.2. Serie de tiempo con los datos de columna de NO₂

La serie de tiempo con la columna de NO₂ medida mediante la técnica de MAX-DOAS en la estación UNAM se presenta en la Figura 11. Entre los años 2013 y 2018 existe una amplia variabilidad en la abundancia de NO₂ medida lo cual indica diferencias horarias y diarias que pueden ser atribuidas a diversas actividades que se llevan a cabo en la Ciudad de México. De especial importancia es identificar eventos con columnas elevadas para de esta forma relacionarlas con eventos específicos acontecidos en la ZMVM.

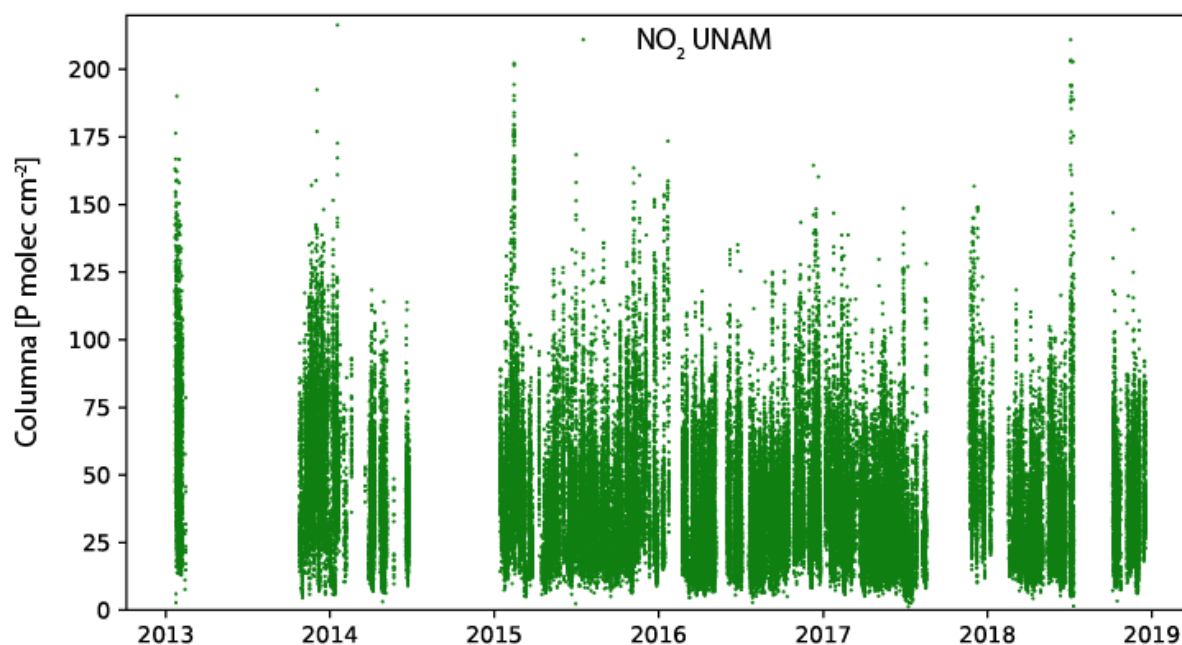


Figura 11. Serie de tiempo con las columnas verticales de NO_2 medidas en la UNAM con el instrumento MAX-DOAS ($1 P = 10^{15}$ moléculas).

6.3. Serie de tiempo con los datos de columna de HCHO

La serie de tiempo con la columna de HCHO medida mediante la técnica de MAX-DOAS en la estación UNAM se presenta en la Figura 12. Entre los años 2013 y 2018 existe una amplia variabilidad en la abundancia de HCHO medida lo cual indica diferencias horarias y diarias que pueden ser atribuidas a diversas actividades que se llevan a cabo dentro de la Zona Metropolitana del Valle de México. De especial importancia es identificar eventos con columnas elevadas para de esta forma relacionarlas con eventos específicos identificados por ejemplo en la abundancia de otras especies químicas, como lo es el NO_2 . Cabe resaltar que la abundancia de HCHO (Figura 12) es menor que la de NO_2 (Figura 11).

En la Figura 13 se muestran las columnas de HCHO medidas con dos técnicas diferentes: MAX-DOAS (azul) y FTIR (rojo) en la estación UNAM, así como FTIR en la estación Alzomoni (verde). Aunque existe variabilidad entre las columnas de HCHO medidas en la estación UNAM por ambas técnicas de medición, el orden de magnitud de ellas es similar. Es importante notar la gran diferencia en la abundancia de HCHO presente en la columna atmosférica cuando las mediciones se llevan a cabo en la estación Alzomoni que cuando las mediciones se llevan a cabo en la estación UNAM.

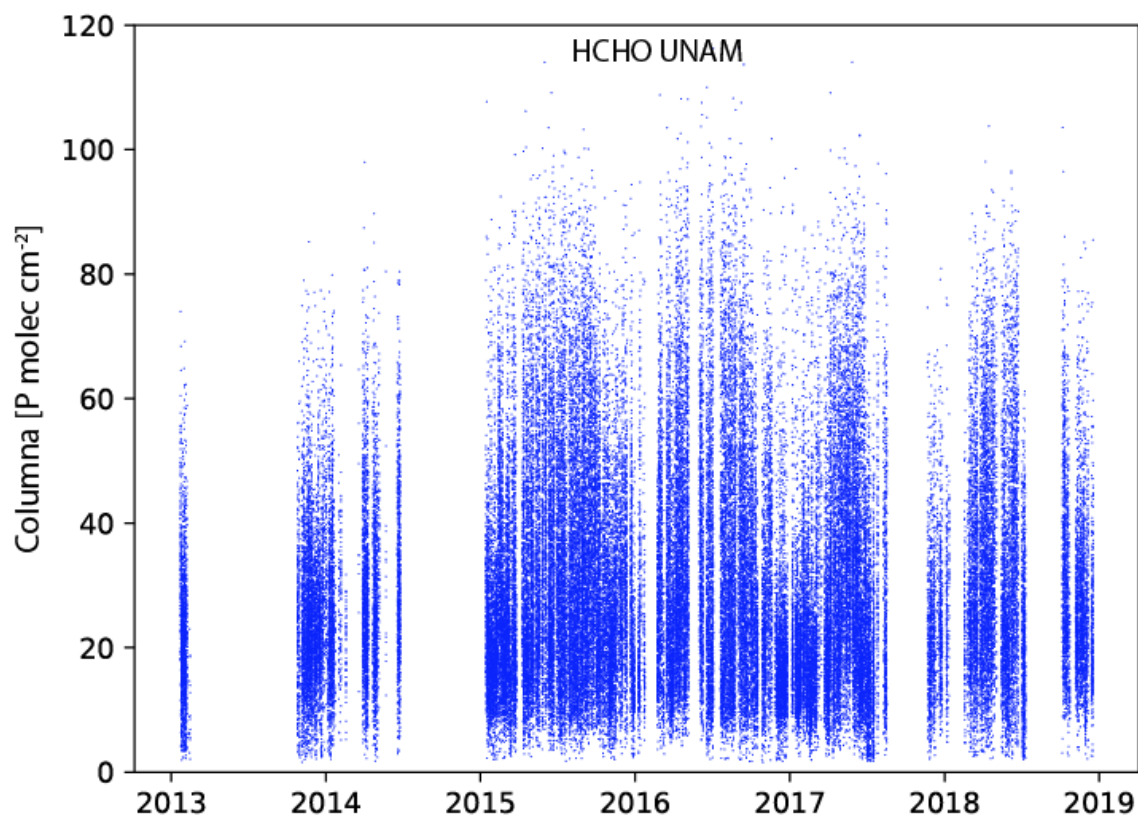


Figura 12. Serie de tiempo con las columnas verticales de HCHO medidas en la UNAM con el instrumento MAX-DOAS (1 P = 10¹⁵ moléculas).

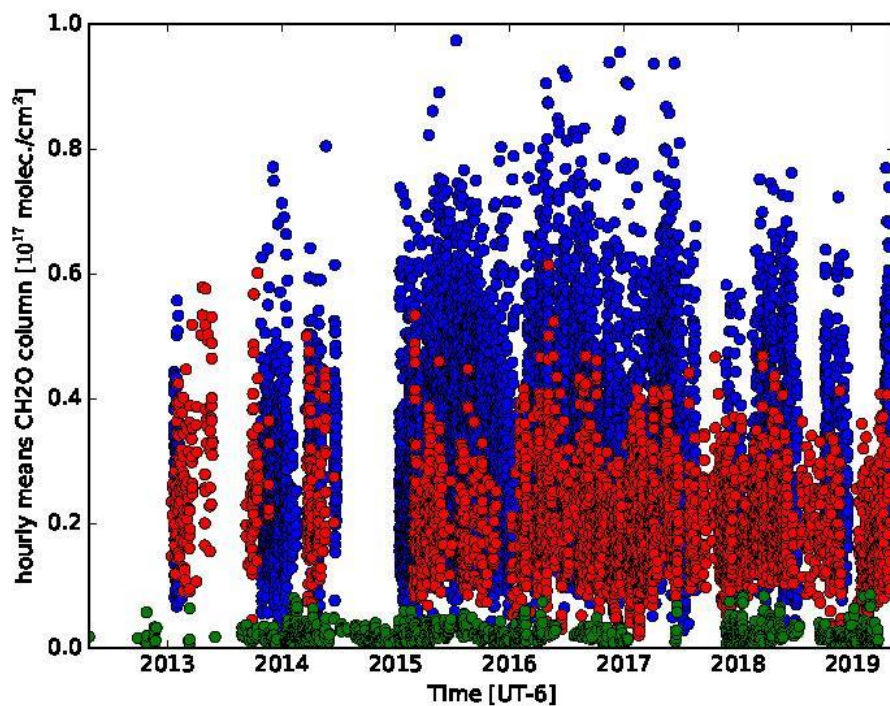


Figura 13. Serie de tiempo con las columnas verticales de HCHO medidas en la UNAM con el instrumento MAX-DOAS (azul) y el instrumento FTIR (rojo). Las columnas verticales de HCHO medidas en la estación Alzomoni con el instrumento FTIR se presentan en verde. Las unidades son moléculas/cm².

6.4. Serie de tiempo con los datos de columna de SO₂

La Figura 14 muestra la serie de tiempo con los datos de columna de SO₂ medidos sobre el la estación UNAM así como sobre la estación Alzomoni con la técnica de espectroscopía FTIR de absorción solar. Existen claros eventos en ambas estaciones en donde la columna de SO₂ se exagerba. Estos eventos pueden ser estudiados a mayor profundidad para determinar si las moléculas de SO₂ detectadas provienen de alguna fuente antropogénica (como puede ser la refinería y central térmica de Tula, Hidalgo) o si provienen de fuentes naturales (como puede ser el caso del volcán Popocatepetl).

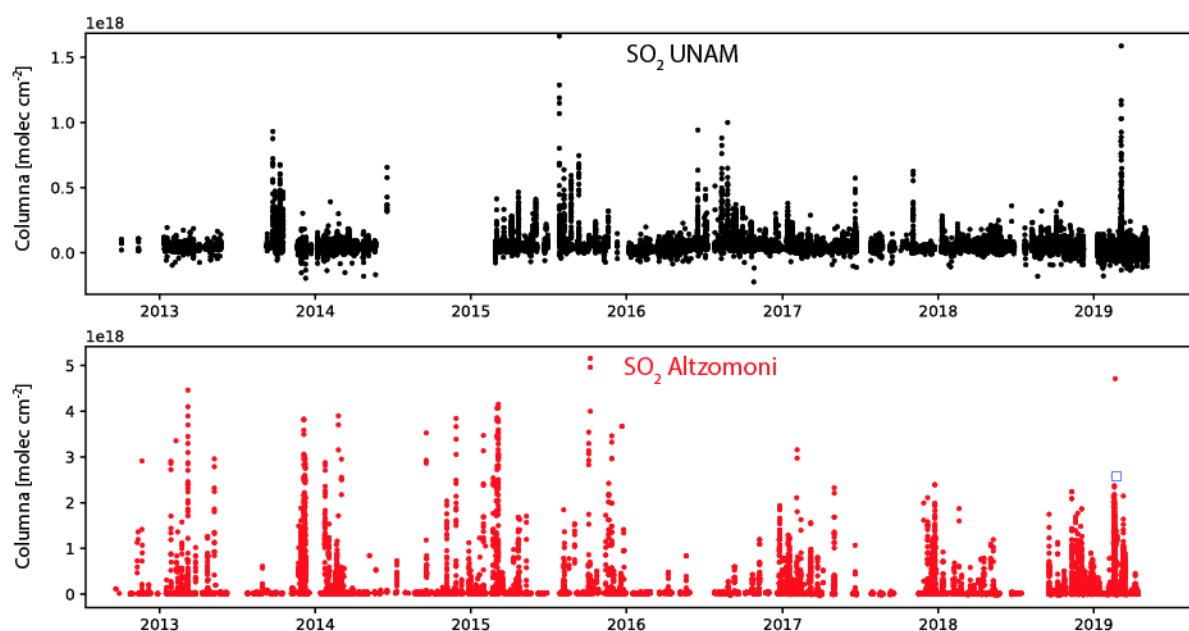


Figura 14. Serie de tiempo con las columnas verticales de SO₂ medidas en la UNAM (arriba) y en Alzomoni (abajo) con los espectrómetros FTIR por absorción solar.

6.5. Mapas con la distribución espacial de gases

6.5.1. Matrices de datos

Los mapas de las bases de datos de NO₂, HCHO y SO₂ provienen del instrumento Ozone Monitoring Instrument (OMI) que se encuentra a bordo del satélite AURA de la NASA. Los datos son de libre acceso y se descargan directamente del portal Earth Data (<https://earthdata.nasa.gov/>) mediante herramientas computacionales. Para los tres gases se utilizaron datos de años completos del 2005 al 2018, así como un mapa del promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018.

De cada archivo se obtuvieron datos de latitud, longitud, hora, columna total de HCHO, porcentaje de nubosidad, así como criterios de calidad de los datos. Se generó una malla con resolución espacial de 0.2° x 0.2° (aprox. 22.2 km x 22.2 km). Se promediaron los datos de cada uno de los contaminantes para cada período y se ubicaron dentro de esa malla los que fueron considerados de buena calidad de acuerdo a criterios definidos por González et al. [2015].⁵ Se utilizaron solamente datos con 20% o menos de cobertura de nubosidad con los que se generó una malla de datos de latitud, longitud y columna promedio.

Los datos de las mallas generadas para los períodos correspondientes, se interpolaron con el método de “Interpolación Polinómica Local” utilizando la función “Kernel Gaussiana” y se obtuvieron bases de datos raster georreferenciadas con resolución espacial de 0.0752° x 0.0752° (aprox. 8.4 km x 8.4 km) las cuales se encuentran disponibles para su descarga en formato GeoTIFF y txt.

Las bases de datos se procesaron mediante el método de renderizado bilinear para una mejor visualización la cual se puede realizar en las facilidades interactivas del Atlas Climático Digital de México, así como con cualquier visualizador Web Map Service (WMS).

Tabla 3. Ejemplo de archivo que contiene la matriz de datos de HCHO para el año 2005 en la República Mexicana

-87.2000	13.9000	-99.0000
-87.0000	13.9000	-99.0000
-86.8000	13.9000	-99.0000
-86.6000	13.9000	-99.0000
-118.000	14.1000	3.68058e+14
-117.800	14.1000	3.91526e+14
-117.600	14.1000	3.49774e+14
-117.400	14.1000	4.01817e+14
-117.200	14.1000	3.92677e+14
-117.000	14.1000	4.07789e+14
-116.800	14.1000	3.74240e+14
-116.600	14.1000	3.79770e+14
-116.400	14.1000	3.82173e+14
-116.200	14.1000	4.13576e+14
-116.000	14.1000	3.46807e+14
-115.800	14.1000	4.28150e+14
-115.600	14.1000	3.97230e+14
-115.400	14.1000	3.59312e+14
-115.200	14.1000	3.68454e+14
-115.000	14.1000	3.61273e+14
-114.800	14.1000	3.95428e+14
-114.600	14.1000	4.46709e+14
-114.400	14.1000	3.68462e+14
-114.200	14.1000	4.09282e+14
-114.000	14.1000	4.26572e+14

⁵ <https://doi.org/10.5194/amt-8-19-2015>

6.5.2. Mapas con la distribución promedio de contaminantes

Las Figuras 15 a la 17 muestran los mapas de distribución de NO_2 , HCHO y SO_2 sobre la República Mexicana medidos con el instrumento OMI a bordo del satélite Aura de la NASA. En los entregables del proyecto se presentan los promedios individuales de cada año, en los que se puede apreciar una variabilidad interanual significativa.

A pesar de que la distribución espacial de estos contaminantes se ve bastante suavizada en el caso del promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018, cada contaminante demuestra una particularidad única. El NO_2 presenta una zona de elevadas concentraciones en el centro del país, localizada en la ZMVM. También hay regiones de mayor densidad de este contaminante en la costa del estado de Texas y California en los EUA, y en las zonas metropolitanas de Monterrey y Guadalajara.

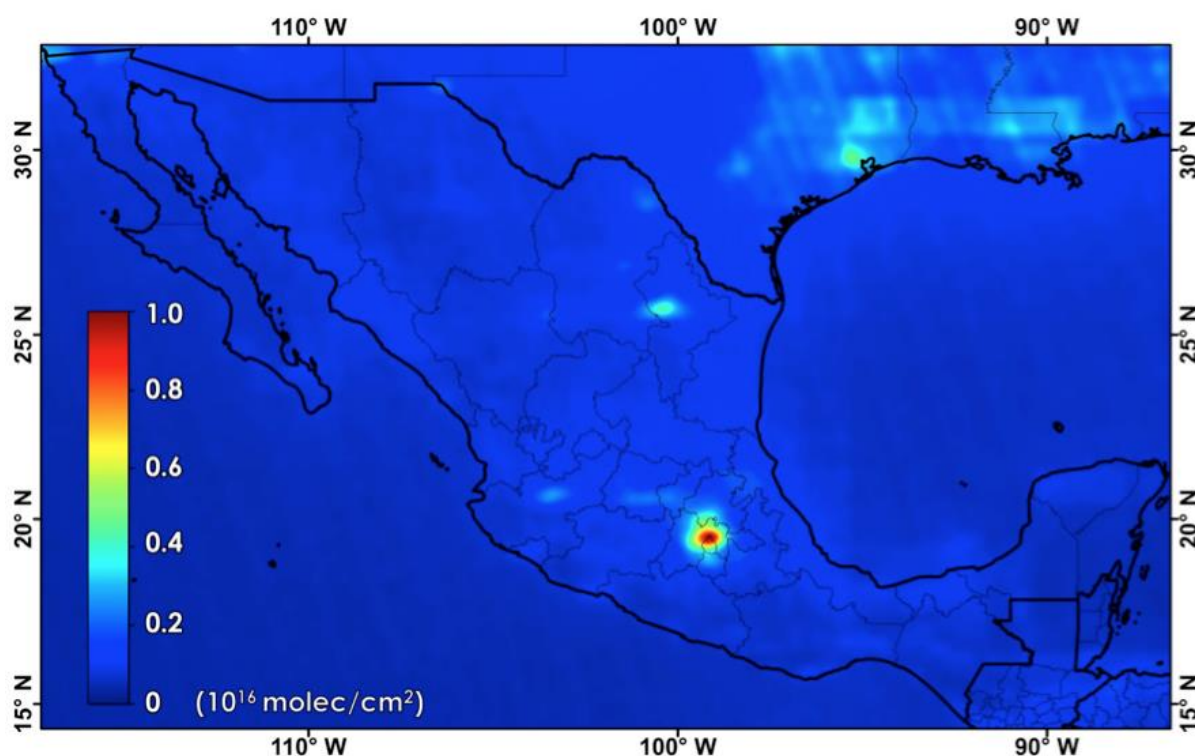


Figura 15. Ejemplo de mapa con el promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018 de las concentraciones de columna de NO_2 medidas con OMI sobre la República Mexicana.

La distribución del formaldehído, por tratarse de un contaminante cuyo origen es tanto primario como a partir de reacciones fotoquímicas, su distribución está dispersa en diferentes regiones del territorio mexicano. Para la formación de HCHO en la atmósfera participan una gran variedad de precursores provenientes de varios tipos de fuentes, como pueden ser las industriales, las de origen urbano, las biogénicas y las de la quema de biomasa. En la Figura 16 es muy notable la persistencia de una zona de altos niveles de HCHO en Guatemala, en la que los incendios forestales y agrícolas probablemente juegan un papel importante.

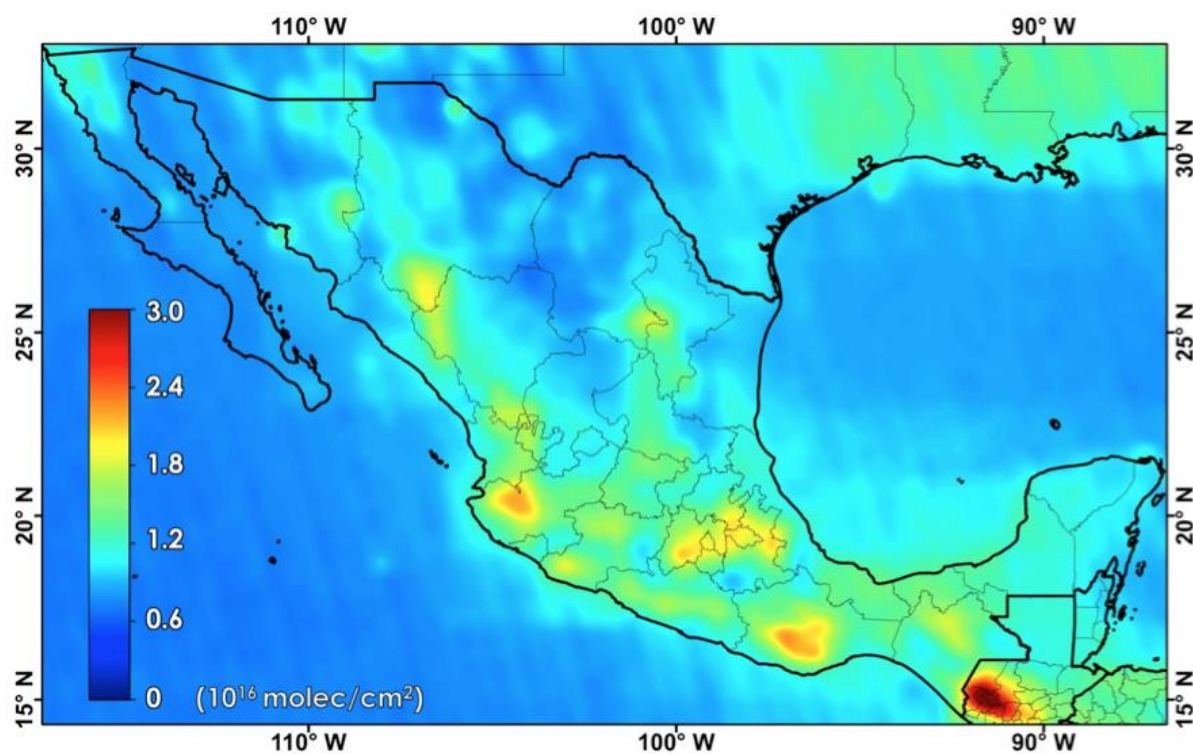


Figura 16. Ejemplo de mapa con el promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018 de las concentraciones de columna de HCHO medidas con OMI sobre la República Mexicana.

La distribución promedio de SO_2 generada con datos de octubre de 2004 a diciembre 2018 por el instrumento OMI sobre el territorio mexicano, muestra un claro aumento de este contaminante en el centro de México. A diferencia del NO_2 , cuya extensión está más confinada a la ZMVM, el SO_2 demuestra una mayor dispersión y abarca un territorio más amplio. Las emisiones del volcán Popocatépetl son probablemente las que mayor influencia tienen en las concentraciones de columna detectadas en esta región, aunque no son las únicas. También existen en el país varias fuentes industriales con importantes emisiones de este gas, como son los complejos para la refinación de combustibles, las petroquímicas, cementeras, y plantas generadoras de energía eléctrica, entre otras.

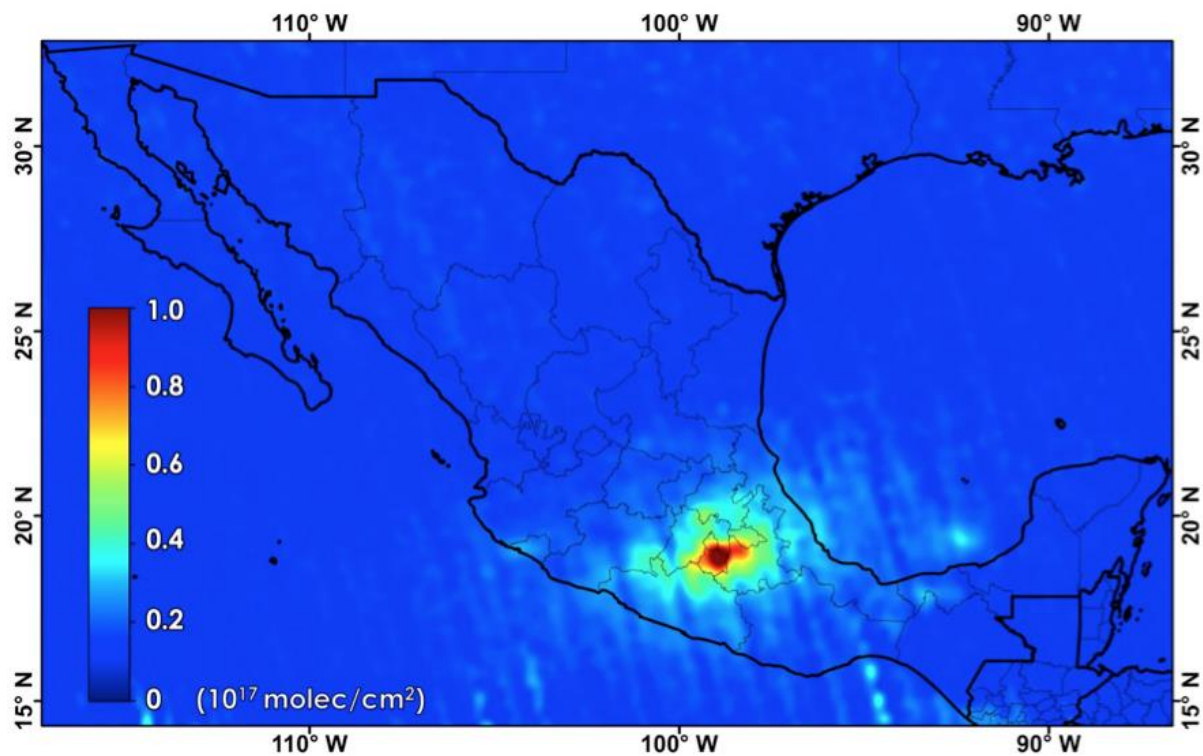


Figura 17. Ejemplo de mapa con el promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018 de las concentraciones de columna de SO_2 medidas con OMI sobre la República Mexicana.

6.5.2. Mapas interactivos

En las facilidades interactivas del Atlas Climático Digital de México se encuentran disponibles las visualizaciones de los tres contaminantes, en sus promedios anuales de 2005 al 2018, así como los promedios de octubre de 2004 a diciembre 2018 (<http://uniatmos.atmosfera.unam.mx/ACDM/servmapas>).

En cada una de las visualizaciones es posible consultar los valores de las variables en cada una de las celdas que conforman el archivo raster correspondiente y tener acceso directo a los metadatos y a la descarga de las bases de datos de cada contaminante. Los metadatos se encuentran incorporados en el Repositorio Institucional de datos científicos geoespaciales del Centro de Ciencias de la Atmósfera de la UNAM.

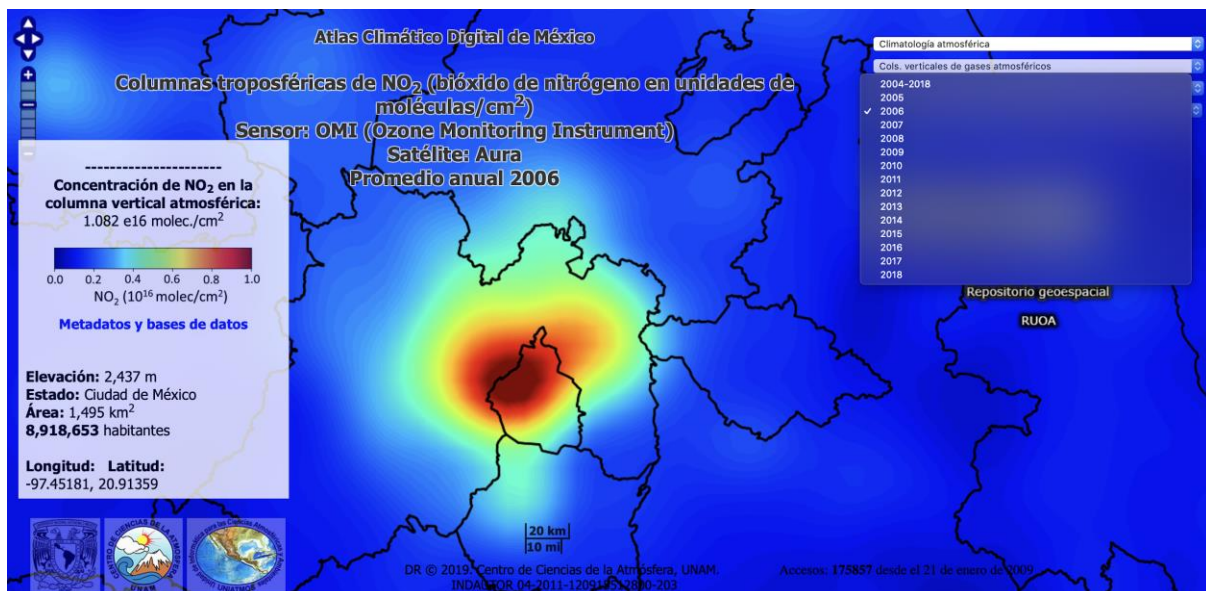


Figura 18. Ejemplo de mapa interactivo del promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018 de las concentraciones de columna de NO_2 medidas con OMI sobre la parte centro de México

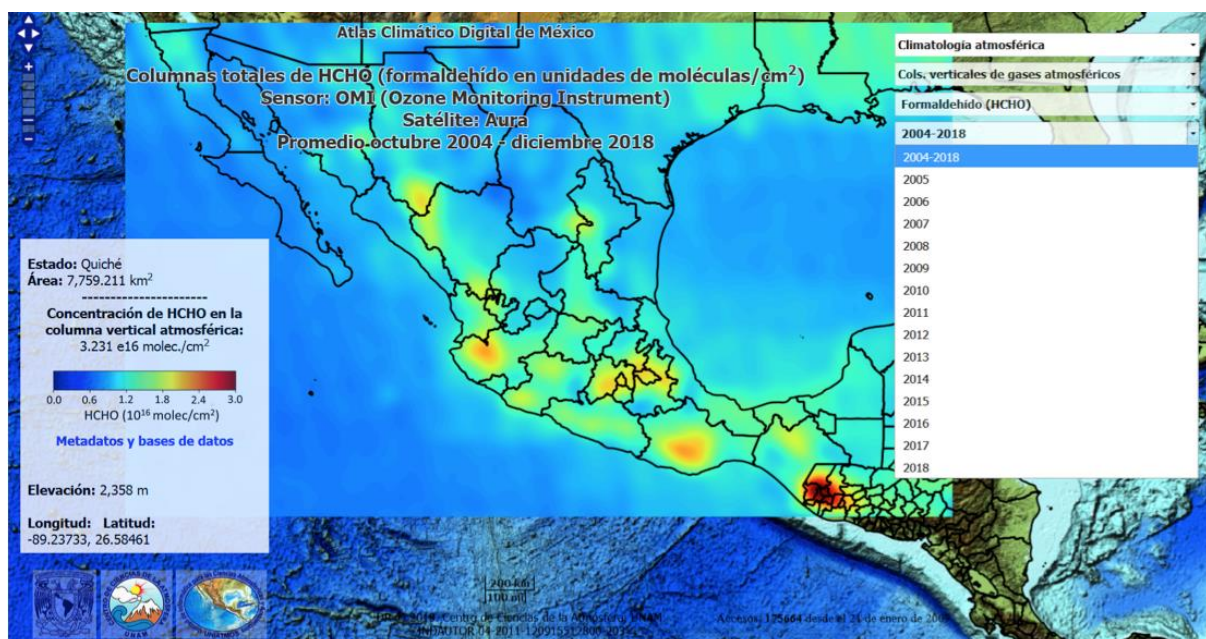


Figura 19. Ejemplo de mapa interactivo del promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018 de las concentraciones de columna de HCHO medidas con OMI sobre la República Mexicana

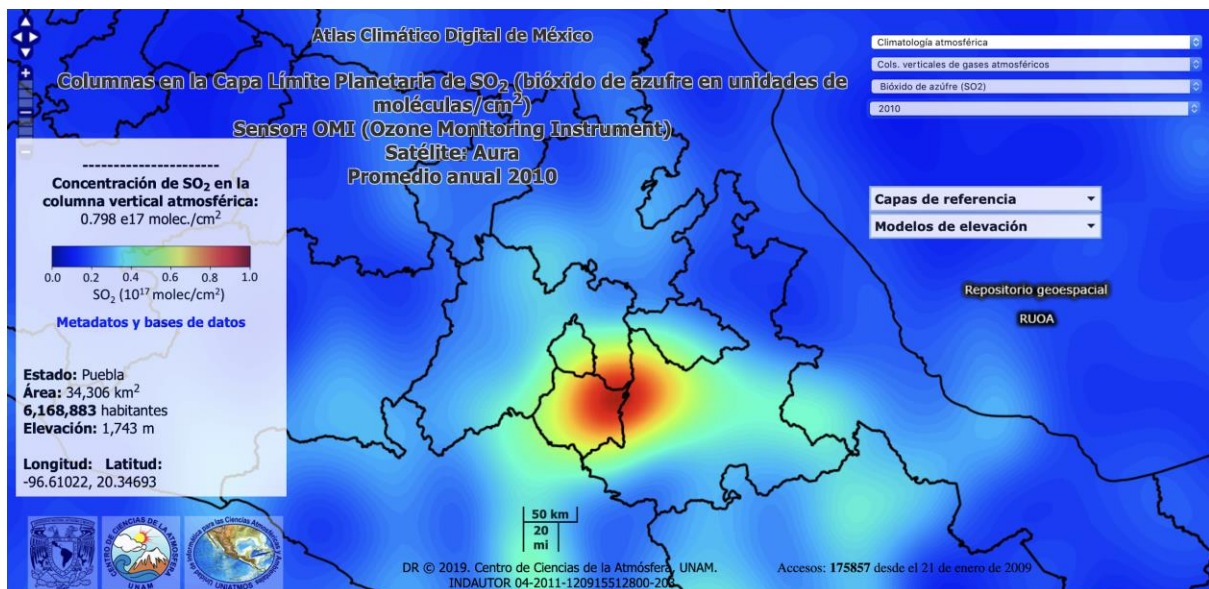


Figura 20. Ejemplo de mapa interactivo del promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018 de las concentraciones de columna de SO_2 medidas con OMI sobre la República Mexicana

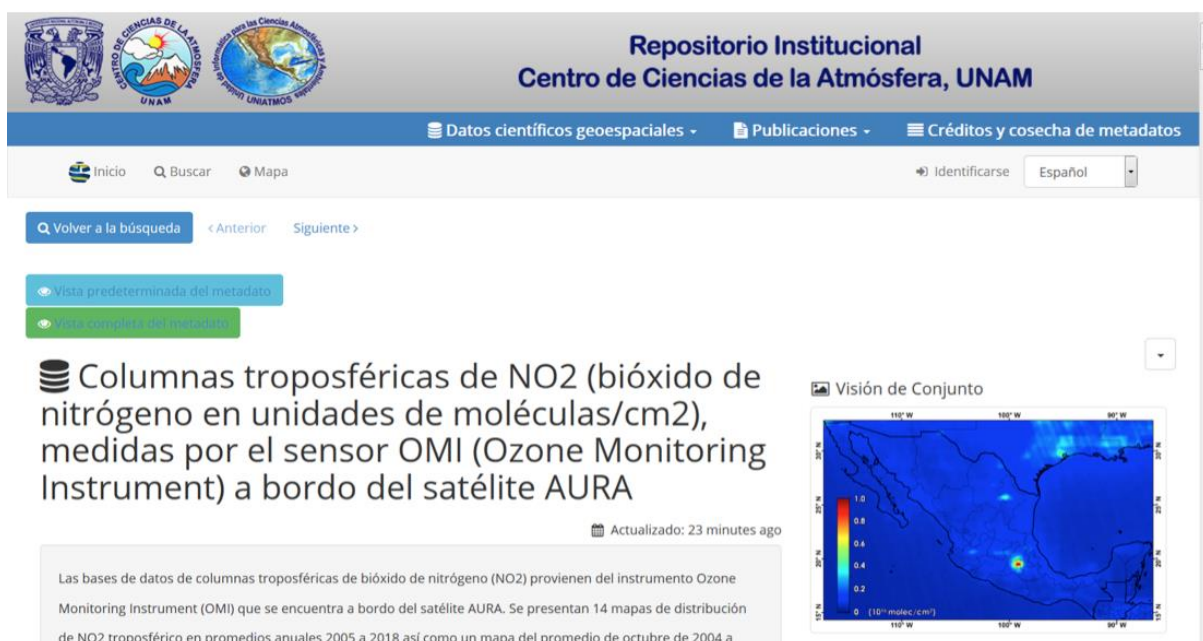


Figura 21. Ejemplo de metadato interactivo interoperable del promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018 de las concentraciones de columna de NO_2 medidas con OMI sobre la República Mexicana



The screenshot shows the Institutional Repository interface for the Center of Atmospheric Sciences at UNAM. The header includes the UNAM logo and the center's name. The main navigation bar contains 'Datos científicos geoespaciales', 'Publicaciones', and 'Créditos y cosecha de metadatos'. Below this, there are search and map icons, a language dropdown set to 'Español', and a 'Volver a la búsqueda' button. The main content area features a title for 'Columnas totales de HCHO (formaldehído en unidades de moléculas/cm²), medidas por el sensor OMI (Ozone Monitoring Instrument) a bordo del satélite AURA'. A sub-header indicates the data is updated 'Actualizado: 25 minutos ago'. A text box explains that the data comes from the OMI instrument on the AURA satellite, showing annual averages from 2005 to 2018 and a specific map for October 2004. To the right, a 'Visión de Conjunto' map displays HCHO concentrations over Mexico, with a color scale from 0 to 3.0 (10⁻⁶ moléculas/cm²).

Figura 22. Ejemplo de metadato interactivo interoperable del promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018 de las concentraciones de columna de HCHO medidas con OMI sobre la República Mexicana



The screenshot shows the Institutional Repository interface for the Center of Atmospheric Sciences at UNAM, similar to Figure 22. The main content area features a title for 'Columnas en la Capa Límite Planetaria de SO₂ (bióxido de azufre en unidades de moléculas/cm²), medidas por el sensor OMI (Ozone Monitoring Instrument) a bordo del satélite AURA'. A sub-header indicates the data is updated 'Actualizado: 25 minutos ago'. A text box explains that the data comes from the OMI instrument on the AURA satellite, showing annual averages from 2005 to 2018 and a specific map for October 2004. To the right, a 'Visión de Conjunto' map displays SO₂ concentrations over Mexico, with a color scale from 0 to 1.0 (10⁻⁶ moléculas/cm²).

Figura 23. Ejemplo de metadato interactivo interoperable del promedio de octubre de 2004 a diciembre 2018 de las concentraciones de columna de SO₂ medidas con OMI sobre la República Mexicana

7. Estudios de validación

7.1. Variabilidad de NO₂ en la Ciudad de México y comparación con datos de superficie

Como ha sido expuesta en el capítulo 4.2, MAX-DOAS es una técnica de percepción remota muy poderosa para la determinación de columnas de gases atmosféricos con resolución vertical. En el trabajo publicado por Friedrich et al. [2018], además de hacer una descripción detallada del código de recuperación de columnas y el análisis de errores del método, se presentan los resultados de NO₂ sobre el sitio CCA-UNAM (sección 5.1) con 18 meses de mediciones. En este estudio, se obtuvieron las columnas verticales de este gas con el código MMF (*Mexican Maxdoas Fit*) y se compararon los resultados con las mediciones en superficie reportadas por la estación "CCA" de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico de SEDEMA en la misma localidad.

En la Figura 24, se presentan los promedios horarios de la columna vertical (VCD) de NO₂ medidas con el instrumento MAX-DOAS con puntos azules (en unidades de moléculas/cm²), así como los datos horarios en rojo de la concentración de este gas medida en superficie (en unidades de ppb). La concentración cerca de la superficie también puede ser calculada a través de la medición con MAX-DOAS promediando las primeras 6 capas del perfil recuperado, la cual se presenta con puntos verdes.

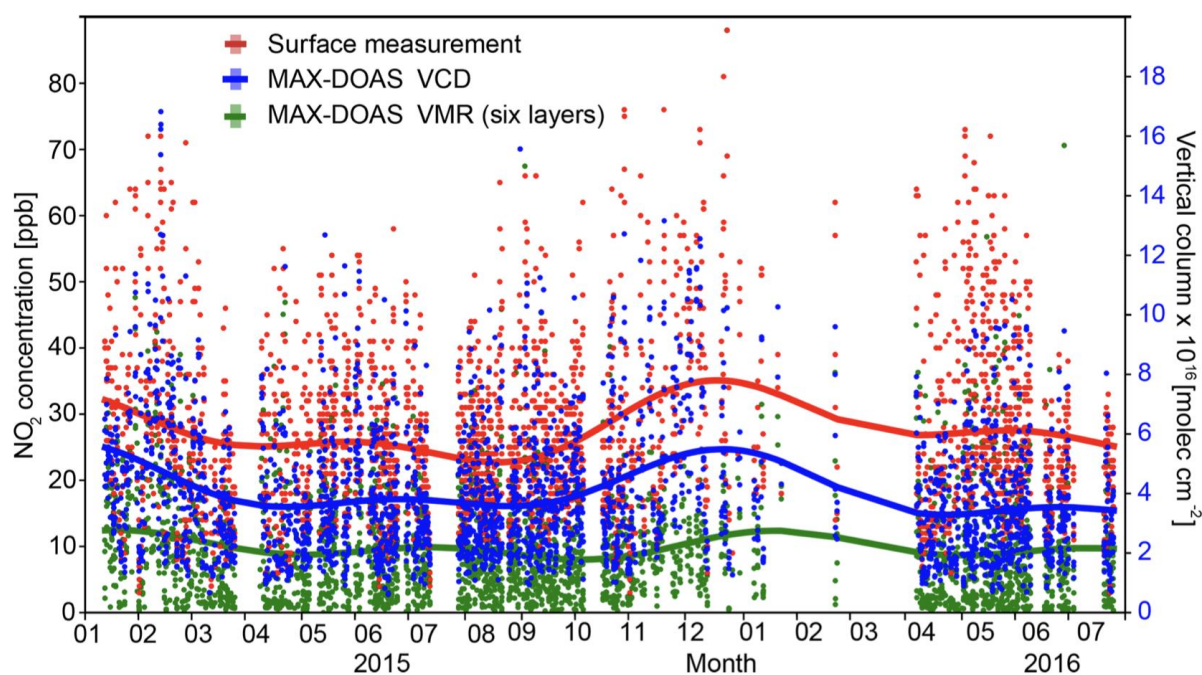


Figura 24. Datos horarios coincidentes de NO₂ medidos en la estación CCA-UNAM al sur de la Ciudad de México, En rojo se presentan las mediciones en superficie de la RAMA, en azul el valor de la columna vertical (VCD) del equipo MAX-DOAS y en verde se muestra el resultado de la concentración (ppb) promediando las primeras 6 capas del perfil obtenido con el MAX-DOAS. Tomado de Friedrich et al. [2018].

Es evidente que los valores de concentración medidos con analizadores in situ son sistemáticamente mayores a los que se miden con MAX-DOAS, sin embargo, la variabilidad estacional es seguida de manera similar por ambos instrumentos. Se calcularon los niveles de concordancia y en la Figura 25 se presentan los resultados. El coeficiente de Pearson en la gráfica de dispersión es alto, con un $R=0.74$ cuando se filtran los datos para incluir únicamente mediciones en condiciones de cielo despejado. Un indicador en este análisis para suponer la presencia de nubes, es si la medición del foto-radiómetro Cimel que contribuye a la red AERONET está o no presente. Esto se debe a que para que haya una medición válida del instrumento Cimel, le tiene que llegar radiación solar directa. El índice de correlación disminuye a $R=0.54$ en condiciones nubladas, como se puede ver en la figura.

Cuando se consideran todas las mediciones en el análisis comparativo, independientemente si estuvo nublado o no, la correlación es de $R=0.6$ y la pendiente en la regresión para este período es de 0.4. Esto quiere decir que el MAX-DOAS a pesar de seguir correctamente la evolución del NO_2 , no tiene una sensibilidad tan alta cerca de la superficie y aunado a que la concentración va disminuyendo rápidamente con la altura, existe una subestimación sistemática de la concentración en superficie por parte del MAX-DOAS. En la Figura 26 se presentan ejemplos de cómo este seguimiento es acertado en días individuales con condiciones muy particulares.

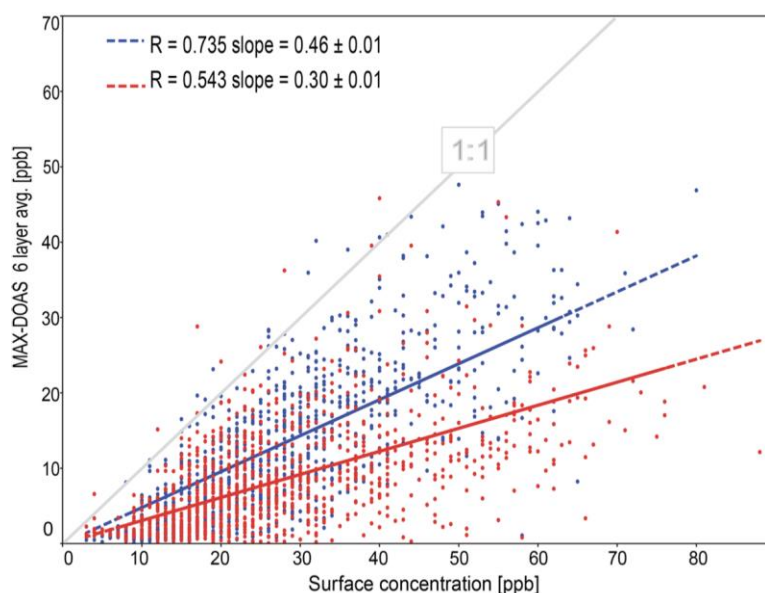


Figura 25. Gráfica de dispersión comparando las mediciones de las concentraciones horarias de MAX-DOAS con aquellas medidas en superficie. Se muestran los coeficientes de correlación para días despejados en azul y para aquellos con la presencia de nubes en rojo.

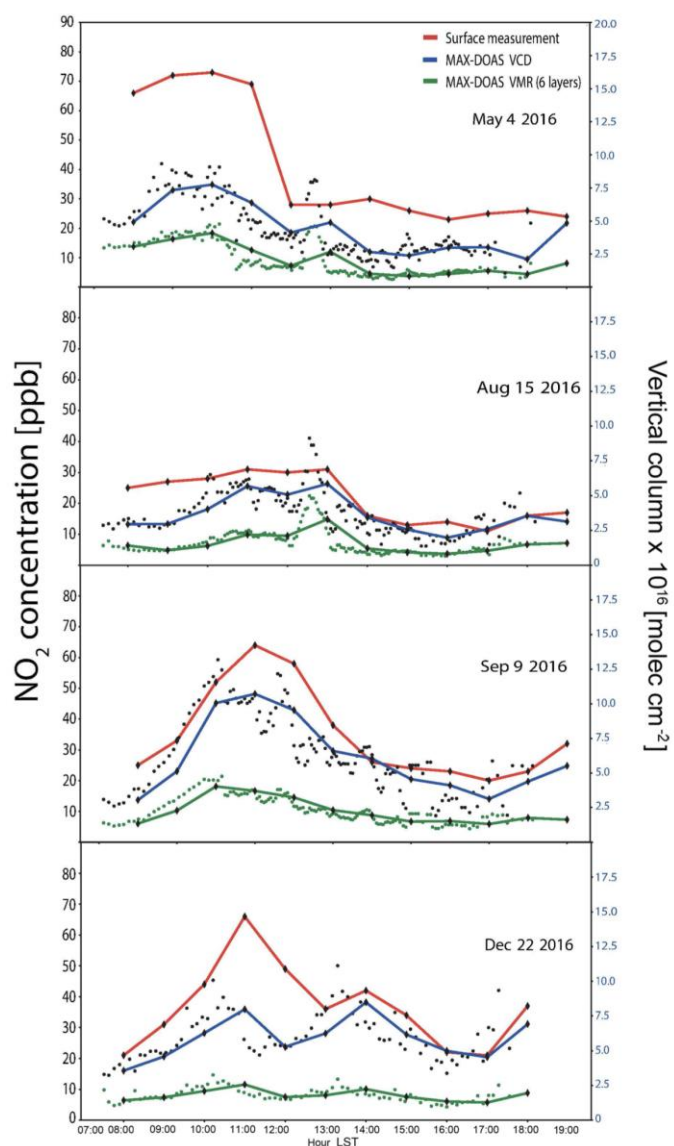


Figura 26. Ejemplos de días particulares en las que se comparó la evolución de NO_2 medida en superficie con un analizador de la RAMA (curva roja) con los datos de columna VCD (azul) y de las primeras 6 capas más cercanas a la superficie (verde) obtenidos con el MAX-DOAS. La tendencia diurna obtenida con estas técnicas aunque como se demostró en la gráfica anterior, existe una subestimación sistemática por el MAX-DOAS.

Algunas de las diferencias tienen que ver con la altura en la que se encuentra la masa de aire con NO_2 , siendo que el máximo de concentración no necesariamente es en la superficie, tal como se observa en la tarde del 22 de diciembre del 2016. Pueden darse diferencias también debido a que la altura de capa de mezcla no es constante durante el día, y la medición de columna va a ser menos afectada por esta dinámica.

Adicionalmente, con los 18 meses de datos colectados en este estudio se determinó la variabilidad estacional y diurna del NO_2 sobre la Ciudad de México, sobre el sitio de CCA_UNAM. En la Figura 27 se presentan los resultados de igual forma comparándolos con las concentraciones en superficie medidas por la red de monitoreo RAMA-SEDEMA.

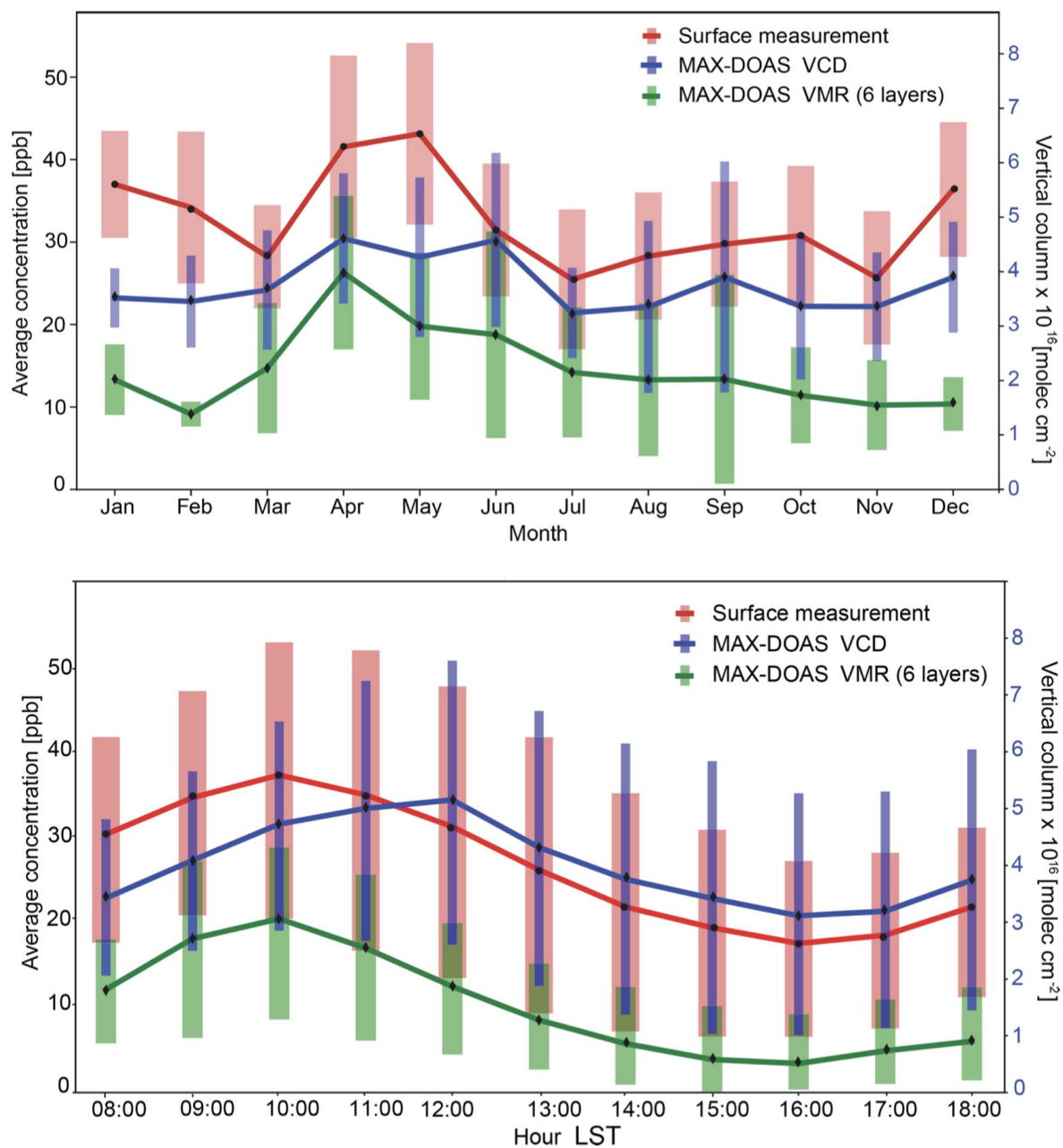


Figura 27. Variabilidad estacional (arriba) y diurna (abajo) obtenida a partir de la promediación de los datos obtenidos con el MAX-DOAS en el periodo del estudio (azul = columna VCD, verde = concentración en ppb de las primeras 6 capas) así como de los datos medidos con un analizador en superficie (rojo). Tomado de Friedrich et al. [2018].

7.2. Comparación de productos satelitales de NO₂ con mediciones de superficie

Como parte un trabajo de tesis de doctorado, se realizó un estudio para comparar las columnas verticales de NO₂ a partir de mediciones de MAX-DOAS realizadas en la ZMVM con los datos disponibles del instrumento OMI a bordo del satélite Aura [Ojeda et al. 2019]. Se buscaron coincidencias en las que las mediciones de ambos instrumentos estuvieran disponibles dentro de un periodo de tiempo de ± 30 minutos y que el centro de la observación satelital estuviera dentro de una distancia menor a 15 km de la medición de superficie.

Se utilizaron datos de los MAX-DOAS ubicados en las estaciones de la RAMA en 1.- El Centro de Ciencias de la Atmósfera de la UNAM (CCA-UNAM), 2.- La FES Acatlán (ACAT), 3.- En Cuautitlán (CUAT) y 4.- El Laboratorio de Análisis Atmosférico de SEDEMA en Vallejo (VALL). En la Figura 28 se muestra un mapa con la distribución promedio de NO₂ sobre la ZMVA, con observaciones de OMI dentro del período 2013 - 2018, y los puntos en los que se están midiendo las columnas con instrumentos MAX-DOAS.

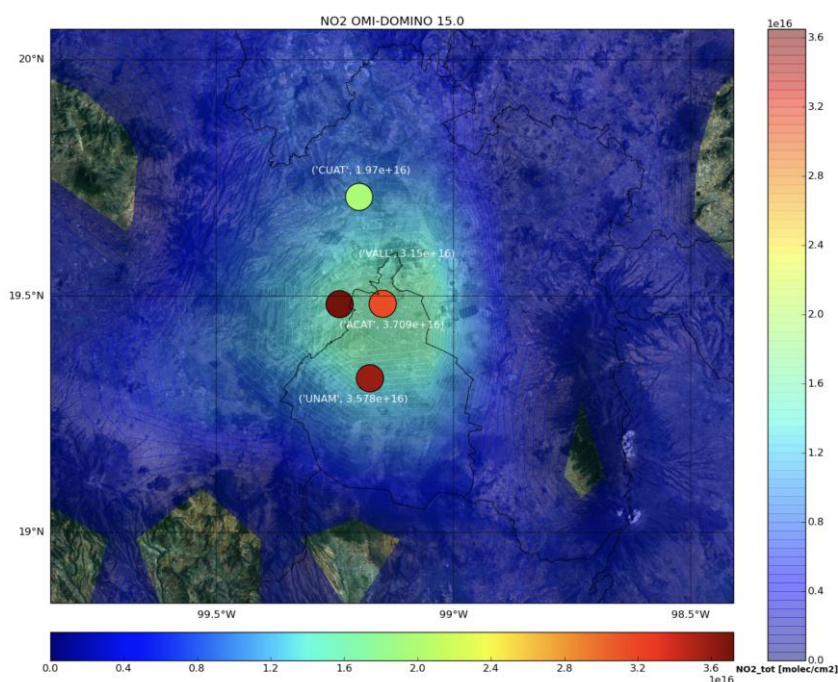


Figura 28. Mapa con la distribución vertical de NO₂ sobre la ZMVM con datos de OMI medidos entre 2013 y 2018. Se muestran los valores promedio para estos periodos en la escala de color (moléculas/cm²) sobre las estaciones con instrumentos MAX-DOAS en la UNAM, FES-Acatlán, Vallejo y Cuautitlán.

Las escalas de colores corresponden al rango de concentración integrada VCD, en unidades de moléculas/cm², en donde también se muestran en las estaciones el valor promedio registrado con las mediciones disponibles de MAX-DOAS. Las columnas promedio más altas se registraron en las estaciones de ACAT y UNAM, seguidas de VALL y las columnas más bajas se registraron en CUAT. Este comportamiento era de esperarse según la distribución del contaminante medida con OMI, sin embargo, se aprecia que estos valores promedio son

significativamente más altos en las mediciones de MAX-DOAS que en el mapa de la medición satelital.

La comparación entre las mediciones realizadas con el instrumento satelital OMI y las mediciones con MAX-DOAS desde la superficie, arroja los resultados presentados en la Figura 29. En ésta se aprecia un coeficiente de correlación R de 0.58 y una pendiente en la regresión usando los datos de coincidencia de las cuatro estaciones de 0.6. Las mayores diferencias en esta comparación se pueden deber a la gran inhomogeneidad, tanto horizontal y vertical, en la distribución de este contaminante. A pesar de que la distribución en la Figura 28 se vea bastante suavizada, hay que tomar en cuenta que ésta es un promedio de varios años de mediciones, realizadas en condiciones muy diferentes y en todas las épocas del año. Se espera que en un día individual, la distribución de NO₂ sea muy homogénea debido a la ubicación irregular de las fuentes y de los patrones de ventilación en ese día en particular. Esos fuertes gradientes se pierden por el tamaño de pixel de la observación satelital, que dependiendo de la inclinación, está en el mejor de los casos en 13x24 km.

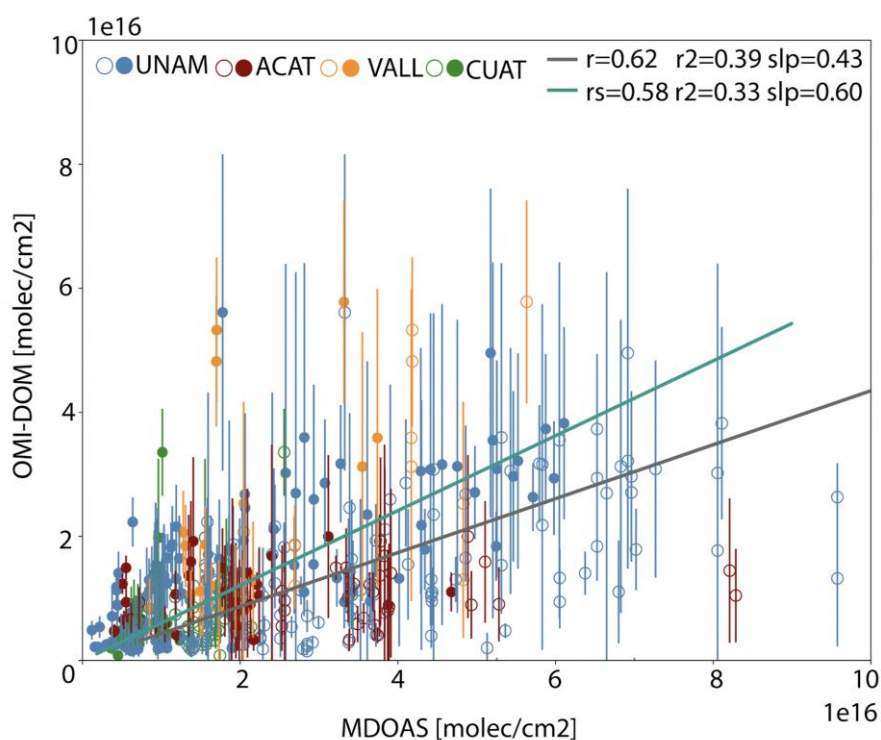


Figura 29. Gráfica de dispersión con los datos coincidentes del instrumento satelital OMI y las mediciones realizadas desde la superficie con datos disponibles de los MAX-DOAS en las 4 estaciones.

Como resultado preliminar de este estudio, se puede concluir que los datos de satélite pudieran estar subestimando la columna vertical real de NO₂. Esto va en acuerdo con estudios realizados previamente en otras partes del mundo en los que se observa una sensibilidad reducida en niveles cercanos a la superficie. Las altas concentraciones y gradientes horizontales de las concentraciones en la ZMVM pudieran hacer esta subestimación más marcada, ya que en nuestro caso

el satélite detecta valores de VCD que son en promedio 40% menores a los medidos con la técnica MAX-DOAS.

7.3. Comparación de la columna de HCHO con dos métodos de medición desde superficie y su distribución espacial⁶

Con la finalidad de estimar las diferencias entre las columnas de HCHO calculadas con la técnica FTIR así como con los instrumentos MAX-DOAS, se llevó a cabo un ejercicio de validación en donde se compararon los resultados de ambas mediciones en el observatorio atmosférico de la UNAM en Ciudad Universitaria. A partir de mediciones llevadas a cabo del año 2013 al 2018, se muestra la comparación en la Figura 18 (panel izquierdo) así como el coeficiente de correlación de Pearson, el cual es de 0.58 con una pendiente de 1.11. Las columnas de HCHO calculadas a partir de las mediciones llevadas a cabo por el instrumento MAX-DOAS se encuentran suavizadas. Los valores de Averaging Kernel, revelando las sensibilidades de ambos instrumentos, se muestran en función de la altitud en el panel derecho de la Figura 30 (MAX-DOAS en color azul y FTIR en color rojo).

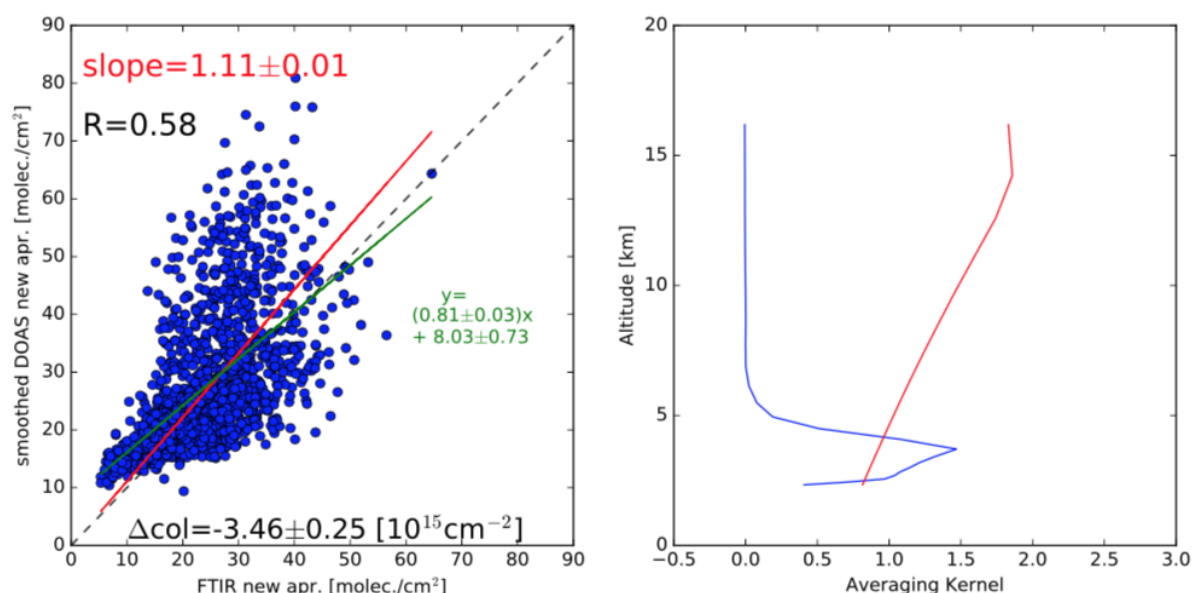


Figura 30. Comparación de las columnas de HCHO (panel izquierdo) a partir de las mediciones realizadas con los instrumentos FTIR (eje x) y MAX-DOAS (eje y) en la estación UNAM; En el panel derecho se muestran los Averaging Kernels de las columnas calculadas a partir de mediciones realizadas por el instrumento FTIR (rojo) y MAX-DOAS (azul) en función de la altitud. [Rivera et al 2019]

La variabilidad promedio horaria en la estación UNAM, entre las 8 y 17 de hora local, se presenta en la Figura 31 (panel izquierdo). Tanto para el FTIR como para el

⁶ Esta sección está tomada de Rivera et al. [2019], actualmente en preparación.

MAX-DOAS se presenta un máximo de columna de HCHO alrededor de las 13 h. En el caso del FTIR, la columna de HCHO disminuye a partir de esa hora y hasta el final del día de medición. En cuanto al MAX-DOAS, la columna de HCHO disminuye después de las 13 horas del día, sin embargo, presenta un aumento a partir de las 16 h y hasta el final de la medición. En el panel derecho se muestra la variabilidad estacional a partir de los promedios mensuales de las columnas de HCHO sobre la estación UNAM medidos con los instrumentos MAX-DOAS (azul) y FTIR (rojo). La desviación estándar se presenta como líneas verticales. En el caso de las mediciones llevadas a cabo por el instrumento MAX-DOAS, se encuentran dos valores máximos durante el año, uno durante el mes de mayo y un segundo máximo durante el mes de septiembre. Para el caso de las columnas calculadas a partir de mediciones realizadas por el FTIR, se observa de igual forma un máximo en el mes de mayo, sin embargo, el segundo máximo se recorre por un mes (en comparación con el MAX-DOAS) y se observa en el mes de octubre. El comportamiento con ambas técnicas de medición es muy similar.

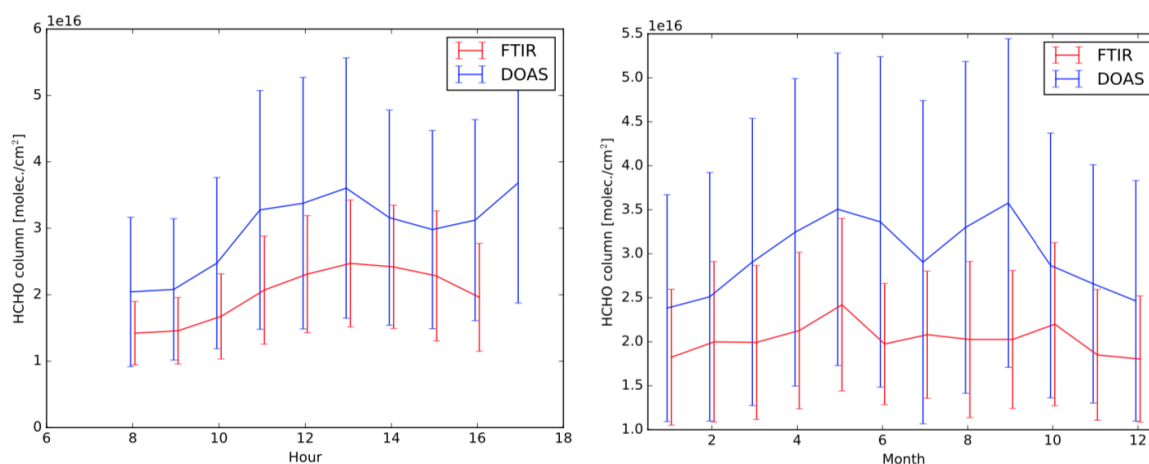


Figura 31. Panel izquierdo: Variabilidad horaria promedio de las columnas de HCHO calculadas a partir de mediciones tomadas con el instrumento MAX-DOAS (azul) y FTIR (rojo) en la estación UNAM. Panel derecho: Variabilidad estacional a partir de los promedios mensuales de las columnas de HCHO medidos con ambos instrumentos.

Con la finalidad de estudiar la abundancia de moléculas de HCHO en la columna atmosférica sobre un sitio de referencia, considerado como más limpio que una zona metropolitana, se presentan en el panel izquierdo de la Figura 32 la variabilidad promedio horaria de columna de HCHO, entre las 8 y las 17 horas, en la estación de Alzomoni. En el panel derecho se presenta la variabilidad estacional a través de promedios mensuales sobre este mismo sitio de medición.

Cabe resaltar el orden de magnitud menor de la abundancia de moléculas de HCHO medidas en la estación Alzomoni cuando se compara con la estación UNAM, siendo Alzomoni un sitio considerado como de referencia, se explica fácilmente que existan menos moléculas de HCHO medidas en la columna atmosférica sobre este sitio que sobre la UNAM. En cuanto a la variabilidad horaria de HCHO sobre Alzomoni, se presenta un incremento considerable de las

columnas medidas entre las 8 a las 14 h y se mantiene alto a partir de esta hora. En cuanto a la variabilidad estacional de HCHO sobre Altzomoni, el promedio mensual mayor se presenta durante el mes de julio, mientras que el menor durante los meses de noviembre y diciembre.

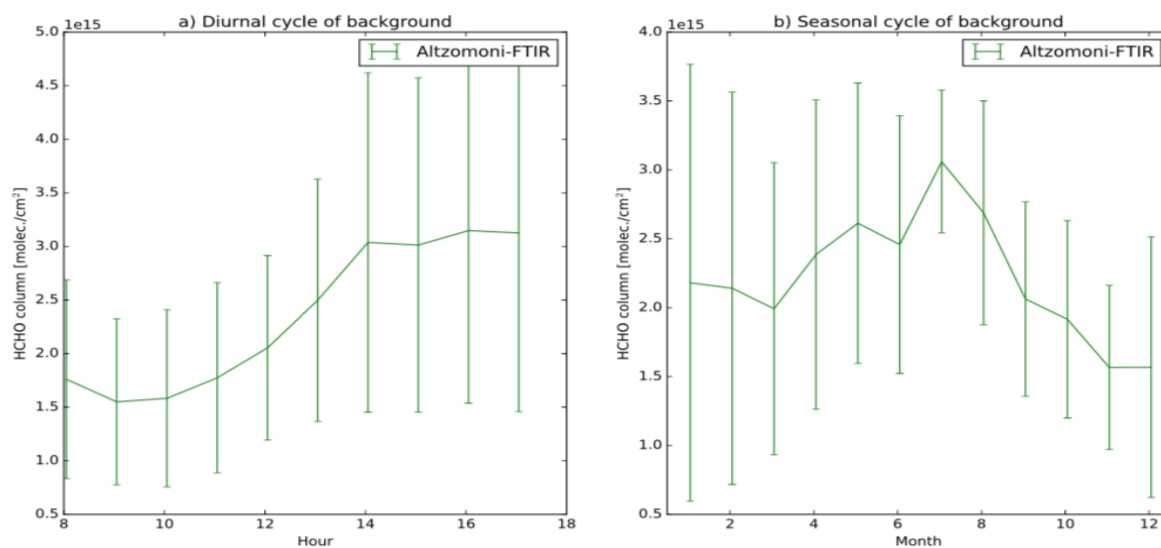


Figura 32. Panel izquierdo: Variabilidad promedio entre las 8 y las 17 horas de las columnas de HCHO calculadas a partir de mediciones tomadas con el instrumento FTIR en la estación Altzomoni. Panel derecho: Variabilidad promedio mensual de las columnas de HCHO calculadas a partir de mediciones tomadas con el instrumento FTIR en la estación Altzomoni.

A partir de mediciones llevadas a cabo por el instrumento OMI de Octubre del 2004 a Diciembre del 2018, se generó un mapa de distribución de HCHO con un acercamiento sobre la Zona Metropolitana del Valle de México (Figura 33). El objetivo principal fue el identificar la distribución específica del HCHO sobre esta zona de estudio así como estudiar su variabilidad espacial, determinando zonas en donde la abundancia de HCHO en la columna atmosférica se exagera o disminuye.

Claramente en este mapa de distribución se observa una mayor abundancia de moléculas de HCHO sobre la zona del Ajusco, Los Dinamos y Desierto de los Leones. Cabe mencionar que el paso del instrumento OMI es entre las 2 y las 3 de la tarde, de tal forma que este mapa de distribución puede ser considerado como información válida solamente durante el tiempo de paso del instrumento OMI. En el futuro, cuando el instrumento TEMPO esté en órbita y llevando a cabo mediciones, este tipo de mapas de distribución podrán ser construidos con una resolución temporal horaria y además no solamente para la molécula de HCHO, sino que también se podrán construir utilizando cualquiera de los productos que se generen a partir de mediciones realizadas por el instrumento TEMPO.

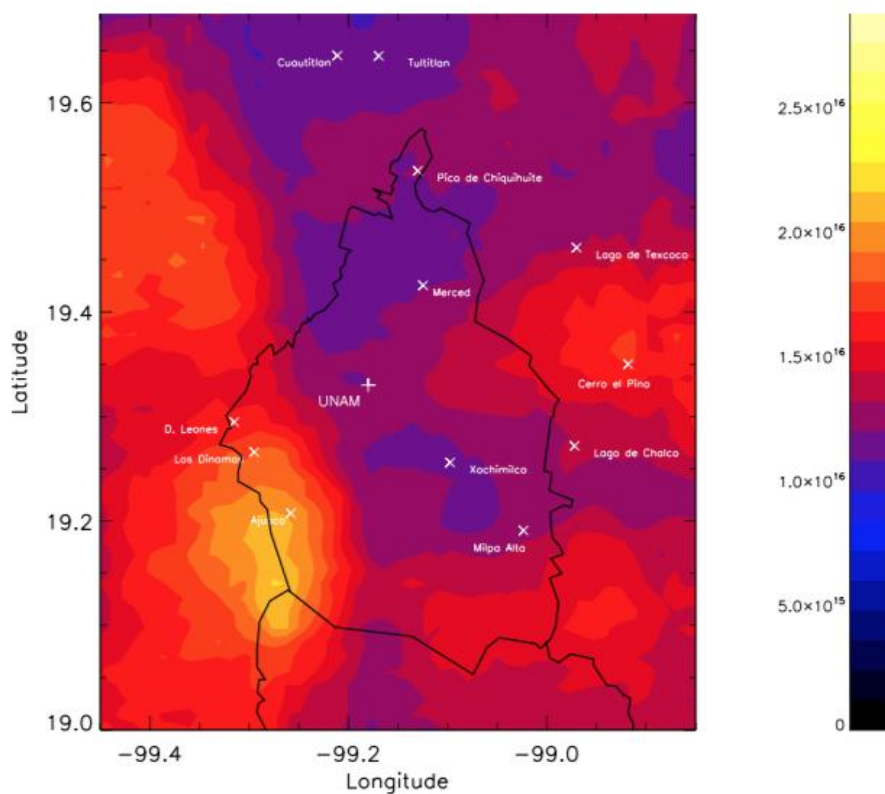


Figura 33. Mapa de distribución de HCHO sobre la Zona Metropolitana del Valle de México construido a partir de mediciones realizadas por el instrumento OMI de Octubre del 2004 a Diciembre del 2018.

7.4. Variabilidad de la columna de SO₂ sobre la Ciudad de México y comparación con productos satelitales

El instrumento *Avantes*, instalado en el CCA-UNAM, es un espectrómetro que mide la intensidad de la luz solar directa en los rangos de longitud de onda ultravioleta, visible e infrarrojo cercano, de 247 a 812 nm. Para la medición de la columna se utiliza la radiación solar directa y para esto, se utilizó el seguidor solar descrito por Bezanilla et al [2014]. El espectrómetro *Avantes* cuenta con 3648 píxeles (o canales), una fibra óptica y un difusor, también llamado “*cosine corrector*” en inglés. Éste último fue instalado para recolectar radiación a más de 180° y eliminar los problemas de interferencia óptica asociados con la geometría de muestreo. El difusor (CC-UV/Vis) está optimizado por aplicaciones de 200 a 800 nm.

Para la recuperación de la columna de SO₂ con el instrumento *Avantes*, se utilizó el software QDOAS⁷. El QDOAS es una aplicación multiplataforma que realiza recuperaciones con técnica DOAS (Differential Optical Absorption

⁷ <http://uv-vis.aeronomie.be/software/QDOAS/>

Spectroscopy) de gases traza de mediciones espectrales con instrumentos satelitales, terrestres, móviles o aeronáuticos. Los principales parámetros de entrada que el QDOAS requiere son: los archivos de calibración y de función de línea, un espectro solar, el rango donde recuperar la concentración de SO_2 y los gases de interferencia. En el rango de absorción de SO_2 , de 300 a 330 nm, con luz solar, el único gas que se consideró como interferencia fue el O_3 (ozono). El SO_2 se recuperó en un intervalo de recuperación de 310 a 340 nm, el mismo intervalo que utiliza el algoritmo de recuperación desarrollado por OMI (Li et al., 2013; Krotkov et al., 2016; Theys et al., 2015). Para el procesamiento de la columna de SO_2 recuperada por el OMI se utilizó el producto para la capa más superficial PBL (*Planetary Boundary Layer*), que corresponde a 0.9 km desde el CMA (centro de altitud de masa).

Con el *Avantes* se pudo recuperar la columna vertical de bióxido de azufre durante un total de 22 días en 3 meses, de octubre hasta diciembre del 2018. En la Figura 23 se presenta la serie de tiempo de SO_2 en unidades de moléculas/ cm^2 ya aplicando la corrección geométrica de columna inclinada a columna vertical, En los 3 meses de análisis se calculó un valor promedio de concentración de SO_2 de 2.75×10^{18} mole// cm^2 , que corresponde a 0.010 DU (unidades Dobson). Este valor en DU es parecido a lo reportado en otras ciudades contaminadas, ~ 0.050 [Wang et al., 2018].

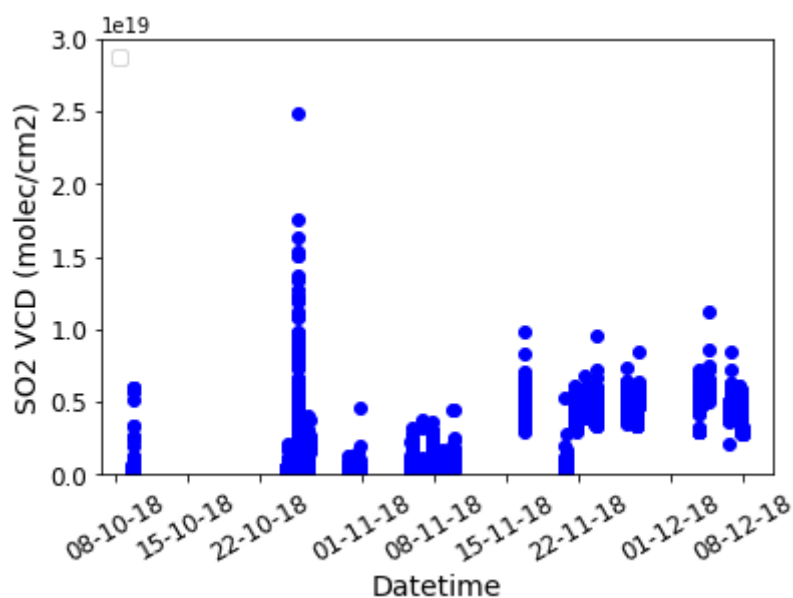


Figura 34: Serie de tiempo de las columnas verticales (VCD) de SO_2 medidas en las UNAM.

Concentraciones anómalas de SO_2 , con picos hasta 3×10^{19} moléc/ cm^2 en 3 meses de mediciones, fueron encontradas el día 25 de octubre 2018. Probablemente, en este día en particular, las condiciones meteorológicas favorecieron el camino de la pluma volcánica del Popocatépetl hacia la ciudad. Para poder comprobar que estamos detectando la pluma volcánica se necesita recuperar más días de medición e implementar la técnica con modelos numéricos [Reynoso-García et

al., 2017] de predicción meteorológica de mesoescala diseñados para la investigación atmosférica, como con el WRF (*Weather Research and Forecasting Model*).

Los valores de fondo de SO_2 fueron estimados en 6.45×10^{17} moléculas/cm², alrededor de una orden de magnitud menor en comparación al promedio de las mediciones tomando en cuenta los días con concentraciones sustancialmente más elevadas de dióxido de azufre con probable detección de pluma volcánica.

En la Figura 35 se presenta el mapa de concentración promedio de SO_2 de el valle de México durante el año 2018. En el mapa se aprecian elevadas concentraciones en el sur de esta región, por posible quema de biomasa. Las concentraciones de SO_2 en la SMVM y en la UNAM se fijan alrededor de $\sim 8 \times 10^{16}$ moléculas/cm², una orden de magnitud de diferencia en comparación con el valor calculado de fondo y dos orden de magnitud con respecto al promedio de los 3 meses tomados en consideración.

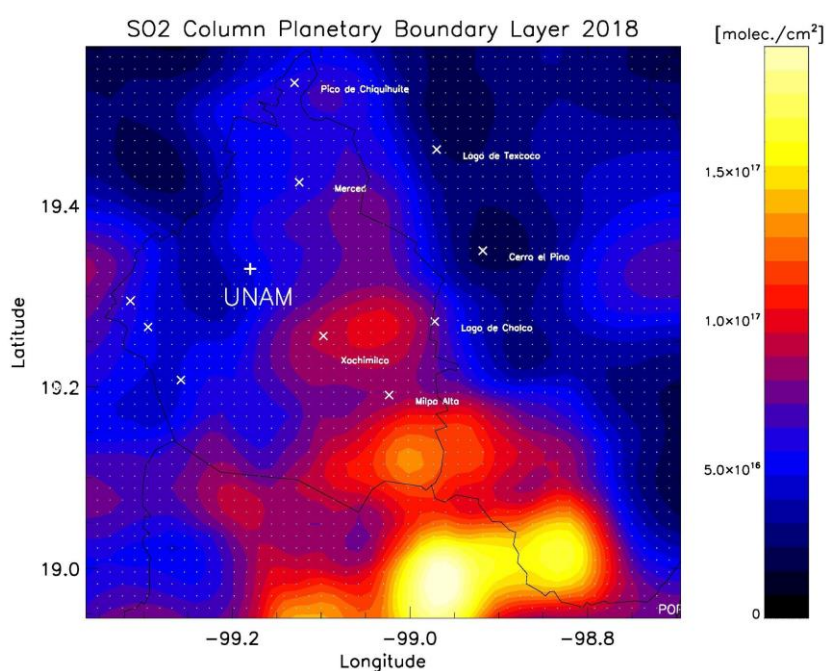


Figura 35: Mapa satelital de concentración de SO_2 sobre el valle de México. Promedios de datos medidos con OMI del año 2018.

7.5. Comparación de las emisiones de SO_2 entre datos satelitales y de Cámara UV de la pluma del volcán Popocatepetl

El instrumento OMI permite medir desde el espacio durante su paso sobre la región del volcán Popocatepetl (aproximadamente entre las 13 y las 14 hora local del centro de México), la densidad de columna de varios compuestos, entre los cuales están O_3 , NO_2 , SO_2 , BrO y la densidad óptica de los aerosoles. Los intervalos espectrales que utiliza el OMI [Theys et al., 2015] son i) w1, de 312-326 nm, ii) w2, de

325-335 nm y iii) w3, 360-390 nm. El OMI emplea imágenes hiperespectrales para observar la radiación solar retrodispersada en el visible y el ultravioleta.

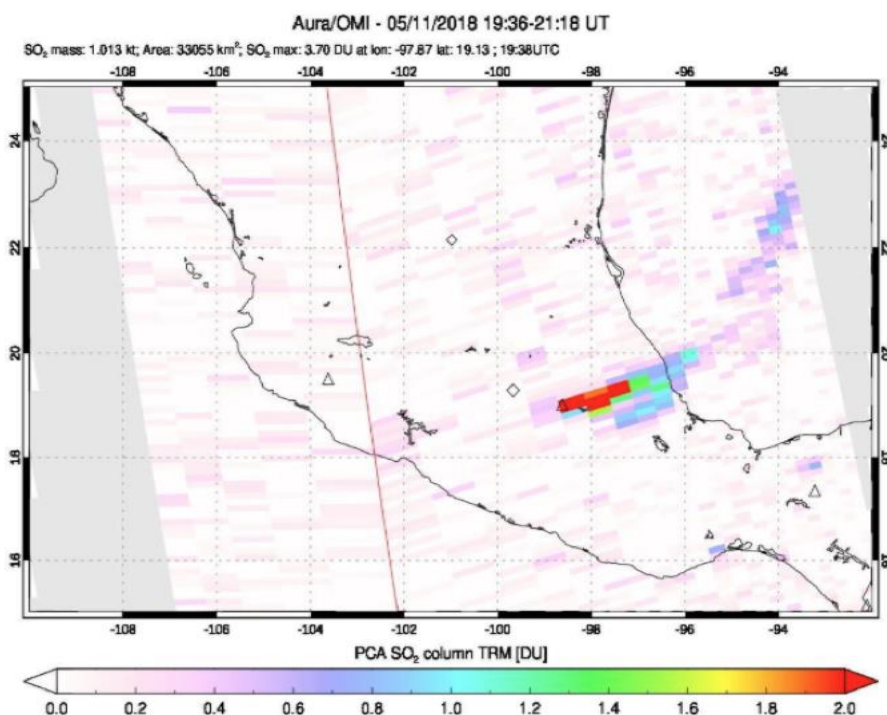


Figura 36: Imagen de satélite AURA/OMI, de la pluma del volcán Popocatépetl. La estimación de SO_2 se encuentra en unidades Dobson y en masa.

La resolución espacial nominal de OMI es de 13×24 km, útil para detectar y rastrear fuentes de contaminación a escala urbana. Las capacidades hiperespectrales mejoran la detección de las cantidades totales de ozono y permiten una auto-calibración radiométrica. Para el cálculo del flujo de SO_2 con el OMI se utilizaron las imágenes y los valores en masa de bióxido de azufre (Figura 36) descargados en la página de la NASA (URL: <https://so2.gsfc.nasa.gov/>).

El satélite pasa arriba del centro de México entre las 2 y las 3 de la tarde, detectando el SO_2 solo en un determinado momento. Para convertir el valor de masa regresado por el satélite en flujo, se tiene que tomar en cuenta la distancia recorrida por la pluma y la velocidad del viento. La cámara UV, actualmente instalada en el Observatorio Atmosférico de Alzomoni en el parque nacional Iztapalapa [Schiavo et al., 2019], toma imágenes de la pluma del volcán Popocatépetl cada 30 segundos y usando estas imágenes secuenciales, es posible calcular la velocidad de la pluma del volcán.

Una vez deducida la distancia que recorre la pluma en la imagen de satélite, esta última se divide por el valor de velocidad del viento en km/h, calculada con la cámara UV. Se usó el valor de velocidad del viento promedio del día. Obtenido este valor se divide por la masa estimada por el satélite, expresada en kt (kilotoneladas) y multiplicando por 24 h se obtiene el flujo volcánico.

La cámara UV es un instrumento que permite calcular la velocidad de la pluma y el flujo volcánico, usando imágenes secuenciales. El algoritmo del “Optical Flow” [Farneback, 2003] devuelve un objeto de flujo óptico que se puede usar para estimar la dirección y la velocidad del movimiento de un objeto. El flujo óptico es el patrón de movimiento aparente de los objetos de una imagen entre dos cuadros consecutivos causados por el movimiento del objeto o la cámara. Es un campo vectorial 2D donde cada vector es un vector de desplazamiento que muestra el movimiento de los puntos desde el primer fotograma al segundo.

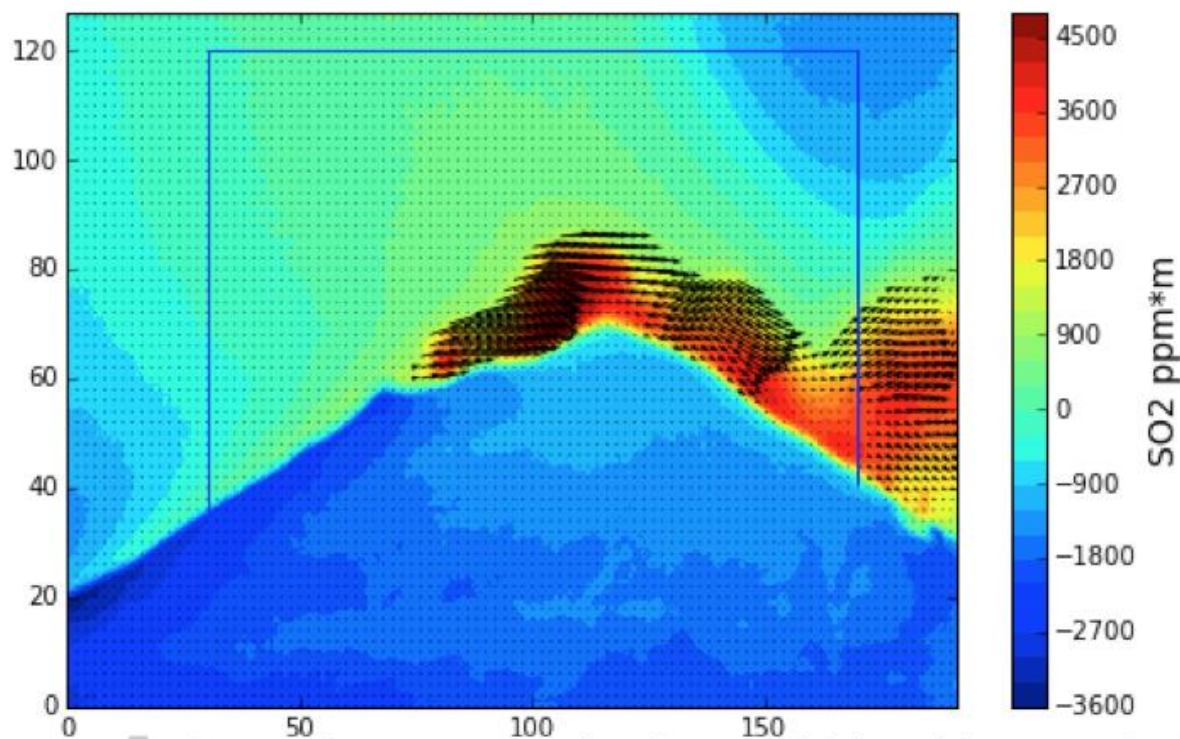


Figura 37: Campo de vectores de la pluma volcánica del Popocatepetl, recuperados con el algoritmo de Farneback [2003].

El algoritmo de Farneback funciona expresando los píxeles cercanos en las imágenes como expansiones polinomiales. Las traducciones entre las expansiones polinomial es para cada cuadro sucesivo se pueden calcular y, al imponer un determinado modelo de movimiento (por ejemplo, el modelo de movimiento afín), se puede estimar el campo de desplazamiento bidimensional. El algoritmo de Farneback también emplea un enfoque iterativo, con una estimación de inicio para el movimiento que se deriva de características generales y luego se refina utilizando características cada vez más finas. En la Figura 38, se calculó el flujo del volcán Popocatepetl con una secuencia de imágenes generando los vectores de viento desde el algoritmo de Farneback.

En 3 años de mediciones con la cámara UV, por un total de 285 días, se pudieron comparar 133 días entre datos terrestres y de satélite.

En Figura 38, se presentan los datos del OMI comparados con los de la cámara UV en toneladas por día (t/d). En general la comparación sirve para validar los datos de satélite y estimar cuánto se está sub o sobre-estimando el gas o contaminante medido. La serie de tiempo de 133 días de comparación registra los valores de flujo medidos promedio por la cámara UV en 2,235 t/d, que resultan en la mayoría de los casos más altos que los datos de OMI (promedio de 1,676 t/d). La subestimación, por consiguiente, es de un 25% para los datos del satélite con respecto a los de la cámara UV.

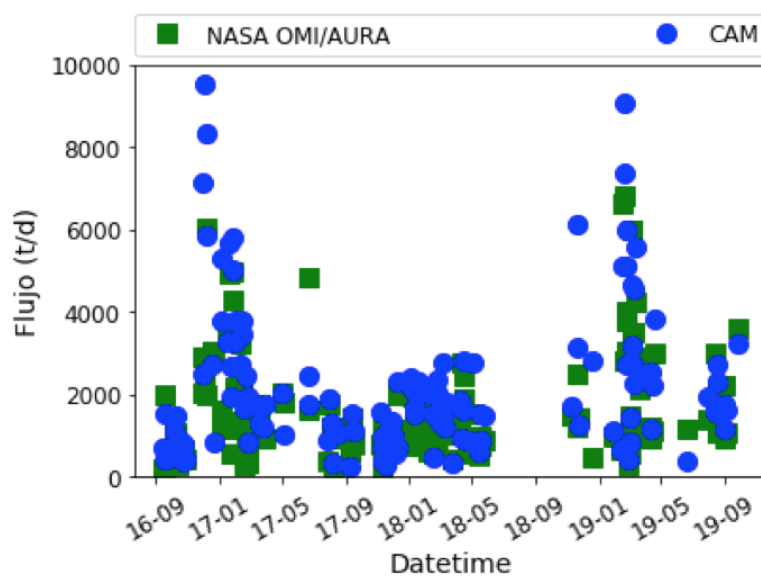


Figura 38: Serie de tiempo con la comparación de las emisiones de SO_2 medidas con el satélite (verde) y con la cámara UV desde la superficie (azules).

La tendencia general es similar para los datos de cámara UV y del OMI, un flujo muy alto se registró en los meses finales del 2016 (noviembre/diciembre) y los primeros meses del 2017 y 2019 (enero/febrero). Después de estos meses los puntos de comparación registran una disminución de la estimación del flujo para subir de nuevo en septiembre del 2017. La mayoría de los datos en los 3 años se recolectaron en temporada seca, desde noviembre hasta marzo/abril, donde la escasez de nubes permite mediciones más frecuentes y por un tiempo más largo en el transcurso del día.

En la Figura 39, se muestra el gráfico de correlación entre los datos de la cámara UV y el OMI. Los resultados de la cámara fueron puestos en el eje x para comprobar cuando la recuperación del flujo con OMI resulte sub o sobre-estimada. La regresión registra una pendiente de 0.65, lo que sugiere la comparación con los resultados de cámara UV, el satélite subestima el flujo de SO_2 . Teniendo en cuenta los días que se pudieron comparar, la medición puntual (una vez al día) del satélite y de los problemas de visibilidad, la correlación ($R^2 = 0.50$) resulta bastante aceptable.

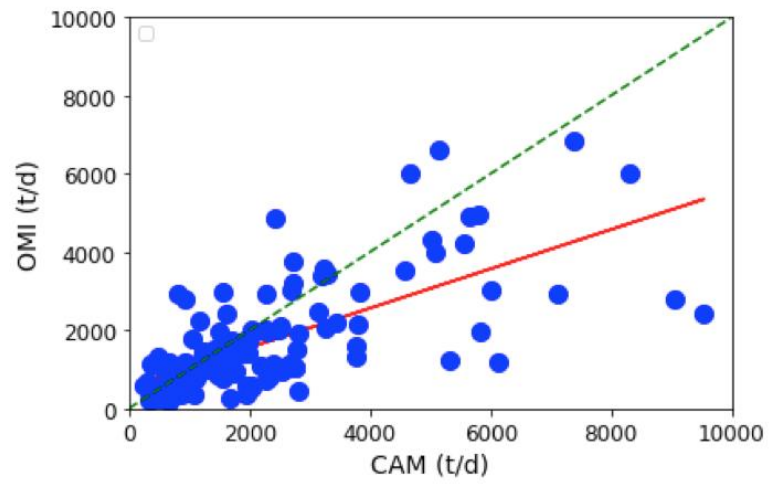


Figura 39: Gráfica de correlación entre Cámara y OMI. Ambos datos están expresados en toneladas per día.

8. Perspectivas a futuro

Como se ha presentado en este informe, se están desarrollando actualmente varios proyectos utilizando las bases de datos que se generan por este grupo de trabajo. Una buena parte del esfuerzo y recursos del grupo se destinan a la operación y mantenimiento de estos sistemas de percepción remota basados en técnicas espectroscópicas.

Entre las investigaciones que se presentan en este informe, destaca el desarrollo y descripción de los métodos de análisis para la obtención de columnas verticales, diseño de los procesos de control de calidad y filtrado de los datos medidos en superficie. Se trabaja de manera continua en el procesamiento de los espectros medidos en superficie e integración de las bases de datos como las que se incluyen como entregables en este proyecto. Se han publicado trabajos en revistas especializadas sobre el diseño y construcción de instrumentos de percepción remota [Bezanilla et al. 2014, Arellano et al 2016]. Los datos han sido analizados para estudiar la variabilidad estacional así como los ciclos diurnos típicos de la Ciudad de México [Friedrich et al. 2018]. En este estudio, presentado en el capítulo 7.1, se compararon las mediciones de columna vertical de NO₂ obtenidas con instrumentos de percepción remota con las concentraciones a nivel de superficie reportadas por la red local de monitoreo.

Como ejemplo de los ejercicios de validación que realizamos de los productos satelitales disponibles actualmente, en el capítulo 7.2 presentamos los avances de un estudio comparativo para NO₂ entre las columnas medidas en 4 sitios de la ZMVM con los datos del satélite de órbita polar Aura/OMI [Ojeda et al 2019], y se reportan las diferencias sistemáticas entre ambas. En otro estudio, se cuantifican las columnas verticales del formaldehído con dos métodos completamente independientes. Una emplea la técnica de espectroscopía de absorción solar directa en el infrarrojo, y la otra técnica usa la espectroscopía pasiva de absorción diferencial en el rango visible para su detección y análisis [Rivera et al. 2019]. Encontramos una buena concordancia entre ellas y los resultados preliminares se presentan en el capítulo 7.3.

En cuanto al bióxido de azufre, se desarrolla actualmente un proyecto para la comparación de la distribución espacial obtenida a partir de datos satelitales, en particular de Aura/OMI, con las columnas verticales medidos con nuestros equipos de percepción remota desde la superficie. Como se explica en el capítulo 7.4, entre las fuentes que contribuyen a la detección del SO₂ desde el espacio destaca el volcán Popocatépetl. En este estudio se presentan ejemplos de cómo la nube de gases volcánicos puede ser transportada largas distancias, y se presentan resultados de los cálculos de la emisión de SO₂ con un desarrollo tecnológico basado en una cámara UV con filtros pasa-banda.

La línea de investigación para la estimación de las emisiones a partir de observaciones de percepción remota y herramientas basadas en la modelación

inversa, es una que ofrece muchas posibilidades a futuro y sobre todo conforme los satélites adquieran la posibilidad de medir las fuentes con una mayor frecuencia, como es aquellos en órbitas geoestacionarias.

9. Conclusiones y recomendaciones

En este informe se presenta el estado actual de las investigaciones en materia de observación atmosférica para la validación de productos satelitales, en el contexto de un programa piloto que nos sirva por un lado para evaluar cuáles son las fortalezas y capacidades que se tienen en México y por el otro cuáles son aún las áreas de oportunidad para seguir mejorando. Nos encontramos actualmente en una nueva era tecnológica en la que la disponibilidad de altos volúmenes de información y en particular para atender los grandes problemas ambientales del planeta están y continuarán en aumento. Las agencias espaciales más importantes en el ámbito internacional están planeando sus programas de observación de la Tierra en misiones para instrumentar satélites en órbitas geoestacionarias, mejorando así sus capacidades para medir un mayor número de compuestos y parámetros atmosféricos, con mayor sensibilidad y resolución espacial y temporal. Esta infraestructura resultará, sin lugar a duda, en una creciente necesidad de asimilar y analizar grandes cantidades de datos.

Un elemento crucial en estas actividades es buscar que los productos generados, que aún presentan incertidumbres considerables por tratarse de mediciones de percepción remota, reduzcan los errores apoyándose en datos observacionales confiables y estudios comparativos. Es de esta manera que surgen las redes de medición en superficie cuya importancia está basada en 1) conocer la confiabilidad de estos productos y 2) seguir aprendiendo cuáles son los factores que pudieran estar afectando más en los algoritmos que se usan para el análisis y cómo pueden ser corregidos a futuro.

En este proyecto se trabajó en describir cuáles son las técnicas empleadas para realizar estos estudios y cómo se han utilizado para evaluar los productos satelitales con los cuales actualmente contamos. Las capacidades adquiridas en los últimos años en México y la infraestructura que se ha logrado montar por este grupo de trabajo, por lo menos en el centro del país, nos ponen en una posición muy favorable para las misiones de observación que están por venir en un futuro cercano. Esto se ha puesto en evidencia por la gran demanda que hay en nuestros datos por la comunidad internacional. Sin embargo, debemos continuar con los esfuerzos para ampliar estas capacidades a través de la formación de recursos humanos y la instalación de equipos de percepción remota en otras partes del territorio nacional, para poder contar con información en regiones con características muy diversas y ayudar en seguir reduciendo las altas incertidumbres que aún se tienen en los productos satelitales.

Como comentario final, se hace la recomendación a la comunidad de trabajar de manera conjunta y coordinada para aumentar simultáneamente las capacidades de asimilación y manejo de la información satelital para la generación de productos propios que sean de utilidad para la toma de decisiones.

10. Referencias

Arellano, J., A. Krüger, C. Rivera, W. Stremme, M M. Friedrich, A. Bezanilla, M Grutter. The MAX-DOAS network in Mexico City to measure atmospheric pollutants. *Atmosfera*. 29(2) 157-167, 2016. ([ATM.2016.29.02.05](https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2016.11.004))

Bezanilla A., A. Krueger, W. Stremme and M. Grutter. Solar absorption infrared spectroscopic measurements over Mexico City: Methane enhancements. *Atmósfera* 27(2), 173-183 (2014).

Bluth G., J. Shannon, I. Watson, A. Prata, Realmuto V. Development of an ultra-violet digital camera for volcanic so2 imaging *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 161 (1) (2007), pp. 47-56. <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2006.11.004>

Chance, Kelly. *Scientia* 2019 (<https://doi.org/10.33548/SCIENTIA388>)

Chance K., X. Liu, C. Chan Miller, G. González Abad, G. Huang, C. Nowlan, A. Souri, R. Suleiman, K. Sun, H. Wang, L. Zhu, P. Zoogman, J. Al-Saadi, J. -C. Antuña-Marrero, J. Carr, R. Chatfield, M. Chin, R. Cohen, D. Edwards, J. Fishman, D. Flittner, J. Geddes, M. Grutter, J. R. Herman, D. J. Jacob, S. Janz, J. Joiner, J. Kim, N. A. Krotkov, B. Lefer, R. V. Martin, O. L. Mayol-Bracero, A. Naeger, M. Newchurch, G. G. Pfister, K. Pickering, R. B. Pierce, C. Rivera Cárdenas, A. Saiz-Lopez, W. Simpson, E. Spinei, R. J. D. Spurr, J. J. Szykman, O. Torres, J. Wang, "TEMPO Green Paper: Chemistry, physics, and meteorology experiments with the Tropospheric Emissions: monitoring of pollution instrument," *Proc. SPIE 11151, Sensors, Systems, and Next-Generation Satellites XXIII*, 111510B (10 October 2019); <https://doi.org/10.1117/12.2534883>

Dalton M.P., I.M. Watson, P.A. Nadeau, C. Werner, W. Morrow, Shannon J.M. Assessment of the UV camera sulfur dioxide retrieval for point source plumes *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 188 (4) (2009), pp. 358-366. <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2009.09.013>

Farneback G. (2003) Two-Frame Motion Estimation Based on Polynomial Expansion. In: Bigun J., Gustavsson T. (eds) *Image Analysis. SCIA 2003. Lecture Notes in Computer Science*, vol 2749. Springer, Berlin, Heidelberg

Friedrich M.M., Rivera C., Stremme W., Ojeda Z., Arellano J., Bezanilla A., García-Reynoso J.A., Grutter M. NO₂ vertical profiles and column densities from MAX-

DOAS measurements in Mexico City. *Atmos. Meas. Tech.*, 12, 2545–2565, 2019. (<https://doi.org/10.5194/amt-12-2545-2019>)

Hase, F., J. Hannigan, M.T. Coffey (more) , 2004: Intercomparison of retrieval codes used for the analysis of high-resolution, ground-based FTIR measurements. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 87, 25-52, 2004 (<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2003.12.008>).

Kern C., T. Deutschmann, L. Vogel, M. Wöhrbach, T. Wagner, Platt U. Radiative transfer corrections for accurate spectroscopic measurements of volcanic gas emissions. *Bull. Volcanol.*, 72 (2) (2010), pp. 233-247, <http://doi.org/10.1007/s00445-009-0313-7>

Krotkov N.A., McLinden C.A., Li C., Lamsal L.N., Celarier E.A., Marchenko S.V., Swartz W.H., Bucsela E.J., Joiner J., Duncan B.N., Boersma K.F., Veefkind J.P., Levelt P.F., Fioletov V.E., Dickerson R.R., He H., Lu Z., and Streets D.G. Aura OMI observations of regional SO₂ and NO₂ pollution changes from 2005 to 2015. *Atmos. Chem. Phys.*, 16, 4605–4629, 2016, <https://doi.org/10.5194/acp-16-4605-2016>.

Li, C., Joiner, J., Krotkov, N. a., and Bhartia, P. K.: A fast and sensitive new satellite SO₂ retrieval algorithm based on principal component analysis: Application to the ozone monitoring instrument, *Geophys. Res. Lett.*, 40, 6314–6318, doi:10.1002/2013GL058134, 2013.

Ojeda, Z., Friedrich, M.M., Stremme, W., Rivera, C.I., Grutter, M. Validation of the vertical column of NO₂ in satellite observations and trends in the Metropolitan Area of Mexico City. 2019. *En preparación*.

Reynoso, J. G., Mora-Ramirez, M., 2017. Implementation of the unified post processor (upp) and the model evaluation tools (met) for WRF-Chem evaluation performance. *Atmósfera* 30 (3), 259-273. doi: ATM.2017.30.03.06

Rivera, C., Guarín, C., Stremme, W., Friedrich, M. M., Rivera, D., Mendoza Rodríguez, C. A., Bezanilla, A., Grutter, M., Blumenstock, T., Hase, F. (2019). Formaldehyde total column densities over Mexico City: comparison between MAX-DOAS and solar absorption FTIR measurements. *En preparación*.

Rivera, C., Stremme, W., Grutter, M. Nitrogen dioxide DOAS measurements from ground and space: comparison of zenith scattered sunlight ground-based measurements and OMI data in Central Mexico. *Atmosfera* 26 (3), 401-414, 2013. (<https://www.revistascca.unam.mx/atm/index.php/atm/article/view/32980>)

Rodgers C. D. (1976). "Retrieval of Atmospheric Temperature and Composition From Remote Measurements of Thermal Radiation". *Reviews of Geophysics and Space Physics* 14 (4). p. 609

Schiavo, B.; Stremme, W.; Grutter, M.; Campion, R.; Guarin, C. A.; Rivera, C.; Inguaggiato, S. Characterization of a UV camera system for SO₂ measurements from Popocaétpetl Volcano. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 2019, 370, 82-94, <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2018.09.001>

Schiavo, Benedetto. "Desarrollo de una Cámara UV para el monitoreo de las Emisiones de SO₂ del Volcán Popocatépetl desde Altzomoni," (PhD diss., UNAM, 2019).

Spurr, R. J. D., Kurosu, T. P., and Chance, K. V.: A linearized discrete ordinate radiative transfer model for atmospheric remote-sensing retrieval, *J. Quant. Spectrosc. Ra.*, 68, 689–735, 2001. [https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(00\)00055-8](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(00)00055-8)

Stremme, W., Grutter, M., Rivera, C., Garcia, A.R., Ortega, I., George, M., Clerbaux, C., Coheur, P.-F. Hurtmans, D., Hannigan, J.W., Coffey M.T. Top-down estimation of the carbon monoxide emissions from the Mexico Megacity based on FTIR measurements from ground and space. *Atmos. Chem. Phys.*, 13, 1357-1376, 2013. (<https://doi.org/10.5194/acp-13-1357-2013>)

Theys, N., De Smedt, I., van Gent, J., Danckaert, T., Wang, T., Hendrick, F., Stavrakou, T., Bauduin, S., Clarisse, L., Li, C., Krotkov, N., Yu, H., Brenot, H., and Van Roozendael, M.: Sulfur dioxide vertical column DOAS retrievals from the Ozone Monitoring Instrument: Global observations and comparison to ground-based and satellite data, *J. Geophys. Res.-Atmos.*, 120, 2470–2491, <https://doi.org/10.1002/2014JD022657>, 2015.

Zoogman, P., X. Liu, R.M. Suleiman, W.F. Pennington, D.E. Flittner, J.A. Al-Saadi, B.B. Hilton, D.K. Nicks, M.J. Newchurch, J.L. Carr, S.J. Janz, M.R. Andraschko, B.B. Baker, B.P. Canova, C. Chan Miller, R.C. Cohen, J.E. Davis, M.E. Dussault, D.P. Edwards, J. Fishman, G. González Abad, M. Grutter, J.R. Herman, J. Houck, D.J. Jacob, J. Joiner, B.J. Kerridge, J. Kim, N.A. Krotkov, R.V. Martin, C.T. McElroy, C. McLinden, V. Natraj, D.O. Neil, C.R. Nowlan, E.J. O'Sullivan, P.I. Palmer, M.R. Pippin, A. Saiz-Lopez, R.J.D. Spurr, J.J. Szykman, O.O. Torres, J.P. Veefkind, B. Veihelmann, H. Wang, J. Wang, A. Wulamu, K. Chance. Tropospheric Emissions: Monitoring of Pollution (TEMPO). *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*. 186. 17-39. (<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2016.05.008>). 2017.