



UNIVERSIDAD DE CHILE – FACULTAD DE CIENCIAS – ESCUELA DE CIENCIAS
AMBIENTALES Y BIOTECNOLOGÍA

“MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN DEL MONÓXIDO DE CARBONO Y EL MATERIAL PARTICULADO EMITIDO POR EL TRÁFICO VEHICULAR: CASO DE VALDIVIA”

Seminario de Título entregado a la Universidad de Chile en cumplimiento parcial de los requisitos para optar al Título de:

QUÍMICO AMBIENTAL

MAURICIO JOSÉ ROZAS PAINEMILLA

Director de Seminario de Título: Dr. Héctor Jorquera González.
Profesor Patrocinante: Dr. Carlos Manzano Dávila.

Diciembre 2021
Santiago – Chile



INFORME DE APROBACIÓN SEMINARIO DE TÍTULO

Se informa a la Escuela de Ciencias Ambientales y Biotecnología de la Facultad de Ciencias, de la Universidad de Chile, que el Seminario de Título, presentado por el candidato:

MAURICIO JOSÉ ROZAS PAINEMILLA

“MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN DEL MONÓXIDO DE CARBONO Y EL MATERIAL PARTICULADO EMITIDO POR EL TRÁFICO VEHICULAR: CASO DE VALDIVIA”

Ha sido aprobado por la Comisión de Evaluación, en cumplimiento parcial de los requisitos para optar al Título de Químico Ambiental.

Dr. Héctor Jorquera González

Director Seminario de Título: _____

Dr. Carlos Manzano Dávila

Profesor Patrocinante: _____

COMISIÓN DE EVALUACIÓN

Dr. Richard Toro Araya

Presidente Comisión: _____

Dr. Manuel Leiva Guzmán

Evaluador: _____

Santiago de Chile, Diciembre del 2021

BIOGRAFÍA



Nací y crecí en la comuna de Pedro Aguirre en un humilde y pequeño cuarto junto a mi hermana y padres situado en la casa de mis abuelos paternos; donde tengo muchos recuerdos jugando dominó con ellos y visitando semanalmente la feria con mi familia para abastecer el hogar. Es aquí, donde di mis primeros pasos por el camino hacia el conocimiento asistiendo a un colegio del barrio.

En el transcurso de los años con esfuerzo propio y el de mis padres, logré acceder a una educación de mayor calidad, en el emblemático “Liceo de Aplicación” de la comuna de Santiago, en el cual formé fuertes lazos con personas que hasta el día de hoy considero como mis mejores amigos. Este hecho coincidió con el periodo en el cual mi familia pudo adquirir su casa propia mediante un subsidio habitacional en la comuna de Maipú. Fue este contexto, en el cual afloró mi interés por las matemáticas, química, física y el reciclaje. Aquellos intereses me motivaron y condujeron a estudiar Química Ambiental, donde tuve el honor de conocer a grandes personas que fueron mucho más que compañeros de universidad, y además a ejemplares docentes que forjaron la persona hoy en día soy. Así, mi motivación por estudiar esta carrera surgió de la intención de entender desde un punto de vista químico los efectos y alteraciones provocados por el ser humano al medio ambiente, con la finalidad ser un futuro profesional que logré aportar al proceso de cambios orientados a un desarrollo sostenible.

*Dedicado especialmente a la persona
más importante en mi vida.*

*Mi madre, que lo ha dado todo
por mí desde que tengo memoria.*

AGRADECIMIENTOS

Agradezco, primeramente, a los docentes de la carrera y en particular al Dr. Carlos Manzano por siempre incentivar me a buscar nuevos rumbos y colaborar con mis proyectos. A la facultad de Ciencias de la Universidad de Chile. Al departamento de Calidad del Aire del Ministerio de medio ambiente y a sus profesionales por enseñarme mucho y ayudarme a dilucidar mi interés por el área de modelación de calidad del aire.

También, agradezco singular y enormemente el apoyo, las oportunidades y los materiales que me ha brindó el Dr. Jorquera en este trabajo.

Agradezco al proyecto FONDECYT N° 1180894, del cual fui participe desarrollando el presente estudio aportando conocimientos e información relevante.

A Powered@NLHPC, ya que esta investigación fue parcialmente apoyada por la infraestructura de supercómputo del NLHPC (ECM-02).

Me gustaría agradecer a mi Madre, mi Hermana, mi Padre y a mis Sobrinos que me ayudaron a lograr y superar este desafío. De igual forma a mis compañeros y amigos de la Universidad, a Oliver, Sebastián, Fernanda e Ignacio, que estuvieron muy presentes en estos años y contribuyeron a mi formación personal. A mis amigos del Liceo, a Gonzalo, Cristóbal y Tomás, por seguir siendo mis fieles compañeros hasta el día de hoy. Y finalmente, agradecer a Gabriela, mi pareja y mejor amiga que fue un pilar fundamental para mí con su amor y empatía apoyándome hasta el final de esta etapa. Para todos los que he nombrado, les agradezco mucho y espero que esos vínculos se mantengan en el tiempo, ya que han sido una parte fundamental de mi vida más allá de lo académico.

TABLA DE CONTENIDO

AGRADECIMIENTOS.....	iv
TABLA DE CONTENIDO	v
ÍNDICE DE FIGURAS.....	vii
ÍNDICE DE TABLAS.....	xii
1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1 La contaminación atmosférica: Una problemática en múltiples escalas.....	1
1.2 La contaminación urbana y el tráfico vehicular	2
1.3 La contaminación vehicular en Chile	5
1.4 El caso de Valdivia: Una ciudad del sur de Chile.....	8
1.5 Modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos.....	10
1.6 AERMOD: Una posible alternativa propuesta por la U.S. EPA.....	15
Hipótesis:	17
Objetivo General:	17
Objetivos específicos:	17
2. METODOLOGÍA.....	18
2.1 Procesamiento de datos de entrada (1° Estadio)	20
2.1.1 Definición de receptores y dominio de modelación	20
2.1.2 Información del terreno	22
2.1.3 Datos meteorológicos del periodo y el área modelada.....	23
2.1.4 Fuentes de emisión de contaminantes.....	25
2.2 Modelación de contaminantes atmosféricos vehiculares con AERMOD (2° Estadio).....	28
2.2.1 Análisis de sensibilidad.....	28
2.3 Levantamiento de datos contaminantes de referencia (3° Estadio)	29
2.3.1 Determinación de material particulado emitido por el tráfico: análisis de contribución de fuentes de aerosoles.....	30
2.3.2 Determinación de contaminación <i>Exhaust</i> y <i>No-escape</i> de referencia: análisis de líneas de borde	34

2.3.3 Estimación del CO emitido por el tráfico: Regresión lineal multivariable	36
2.4 Evaluación estadística de los resultados modelados (4° Estadio)	37
3. RESULTADOS	42
3.1 Análisis de incertidumbre de la información meteorológica: Evaluación de WRF	42
3.1.1 Análisis cualitativo histórico de la velocidad de viento de la EMCA Valdivia I.	50
3.2 Análisis exploratorio de información de emisiones	52
3.3 Análisis de sensibilidad de integración de fuentes.....	59
3.4 Levantamiento de datos de referencia.....	60
3.4.1 Determinación del material particulado <i>Escape</i> y <i>No-Escape</i> : Análisis de líneas de borde (ALB).....	64
3.4.2 Estimación de la concentración de CO emitido por fuentes vehiculares: Modelo de regresión lineal múltiple (MLR).....	68
3.5 Evaluación del modelo AERMOD.....	74
3.5.1 Evaluación cualitativa de AERMOD	74
3.5.1 Evaluación cuantitativa de AERMOD	81
4. DISCUSIÓN.....	89
4.1 Análisis del sistema de modelación AERMOD	89
4.2 Análisis de información meteorológica y de emisiones.....	92
4.3 Análisis de modelos de reparto de fuentes.....	95
4.4 Aerosoles contaminantes modelados	96
4.5 Monóxido de carbono (CO)	99
4.6 Desempeño predictivo temporal de AERMOD.....	101
4.7 Limitaciones y proyecciones:.....	102
5. CONCLUSIÓN.....	107
6. BIBLIOGRAFÍA.....	110
7. ANEXO.....	121

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Diagrama de flujo general del diseño metodológico del estudio.....	19
Figura 2. Cartografía de la ciudad de Valdivia y el receptor utilizado en la modelación.	21
Figura 3. Esquema general del preprocesamiento de datos de emisión de MP_{10} , MP_{10} y CO producido por fuentes vehiculares.	26
Figura 4. Representación de la red de arcos y zonas definidas en MODEM para la ciudad de Valdivia.....	27
Figura 5. Cartografía de la ciudad de Valdivia con los radios de integración de fuentes del análisis de sensibilidad, el receptor utilizado en la modelación con AERMOD y los arcos definidos por la implementación de MODEM.....	29
Figura 6. Rosa de sesgos de vientos del modelo WRF vs SINCA (Valdivia I).....	42
Figura 7. Rosa de vientos de los datos de SINCA (Valdivia I) durante el 2019.	44
Figura 8. Series temporales de las variables meteorológicas modeladas promediadas mensualmente por WRF y valores monitoreados por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el año 2019.	46
Figura 9. Diagrama de Taylor de las variables meteorológicas modeladas por WRF y la información observada brindada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA.	48
Figura 10. Serie temporal histórica de la velocidad de viento muestreada por la EMCA Valdivia I y la EMCA Las Encinas (Temuco).	51
Figura 11. Gráfico de barras de la emisión anual de aerosoles contaminantes en las tres zonas de la red vial de Valdivia según contaminante. PLMP: Material Particulado <i>No-escape</i> . MP: Material particulado <i>Escape</i>	53
Figura 12. Gráfico de barras de la emisión anual del CO vehicular en las tres zonas de la red vial de Valdivia definidas en MODEM.	56
Figura 13. Perfil de factores de emisión variables normalizados en distintas etapas de la semana diferenciados por zonas. El valor 1 del eje de las ordenadas (eje y) corresponde al caso de la hora punta matinal en día laboral.	58
Figura 14. Series temporales de las concentraciones obtenidas en AERMOD de MP_{25} <i>Escape</i> utilizando diversas entradas de información meteorológica y distintos radios de integración de fuentes.	59

Figura 15. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la estimación de concentración de los $MP_{2,5\text{ wb}}$, $MP_{2,5\text{ soa}}$ y $MP_{2,5\text{ tr}}$ resueltos por AC junto a la concentración de $MP_{2,5}$ ambiental durante el 2019.	62
Figura 16. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la estimación de la concentración de $MP_{2,5}$ atribuible al tráfico vehicular AC durante el 2019.	63
Figura 17. Serie temporal de la estimación de la concentración histórica de $MP_{2,5}$ y MP_{10} atribuible al tráfico vehicular por AC.....	64
Figura 18. Diagrama de dispersión de la concentración de $MP_{2,5}$ y el MP_{10} proveniente del tráfico vehicular y la representación de las líneas de borde del modelo utilizado con sus respectivos coeficientes de regresión.....	65
Figura 19. Series temporales de la concentración de material particulado fino y grueso emitido de forma <i>Escape</i> y <i>No-escape</i>	66
Figura 20. Serie temporal de validación de MLR de un mes aleatorio (Julio/2019) donde se muestran los niveles de monóxido de carbono ambientales medidos por la EMCA Valdivia I y los predichos por el MLR aplicado.....	69
Figura 21. Diagrama de dispersión de los residuos del modelo de regresión y la concentración ambiental de monóxido de carbono en todo el periodo modelado.....	70
Figura 22. Diagrama de dispersión de la concentración de CO estimada por el modelo de regresión y el CO ambiental cuantificado por la EMCA Valdivia I. El segmento azul trazado en gráfico representa un factor de ajuste perfecto entre la predicción y la variable explicada.	72
Figura 23. Series temporales de los aerosoles modelados por distintas configuraciones de AERMOD y sus respectivos valores de referencia resultantes del análisis realizado anteriormente (PL=No-escape).....	75
Figura 24. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración MP_{10} <i>No-escape</i> modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019.	77
Figura 25. Series temporales semanales del monóxido de carbono modelado por distintas configuraciones de AERMOD y sus respectivos valores de referencia resultantes del análisis realizado anteriormente.....	78
Figura 26. Diagramas de Taylor de los aerosoles <i>Escape</i> modelados por AERMOD en comparación con los valores de referencia.	79
Figura 27. Diagrama de Taylor de las concentraciones diarias monóxido de carbono (CO) modelado por AERMOD en comparación con los valores de referencia.	81

Figura 28. Gráfico de barras del sesgo medio normalizado (NMB) y el error medio bruto normalizado (NMGE) de cada predicción de valores semanales en cada contaminante señalado (MP_{25} y MP_{10} Escape y CO). Los valores analizados corresponden a concentraciones semanales con meteorología 100% modelada en el caso de los aerosoles y meteorología híbrida en el caso del monóxido de carbono. .. 86

Figura A1. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la temperatura modelada por WRF y muestreada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el 2019. 122

Figura A2. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la humedad relativa modelada por WRF y muestreada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el 2019..... 122

Figura A3. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la velocidad del viento modelada por WRF y muestreada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el 2019..... 123

Figura A4. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la dirección del viento modelada por WRF y muestreada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el 2019..... 123

Figura A5. Series temporales de los estadísticos de evaluación de la temperatura modelada por las dos configuraciones del modelo WRF para el año 2019. 124

Figura A6. Series temporales de los estadísticos de evaluación de la humedad relativa modelada por las dos configuraciones del modelo WRF para el año 2019. 124

Figura A7. Series temporales de los estadísticos de evaluación de la velocidad del viento modelada por las dos configuraciones del modelo WRF para el año 2019..... 125

Figura A8. Serie temporal histórica de la dirección de viento muestreada por EMCA Valdivia I y EMCA Las encinas. 125

Figura A9. Serie temporal histórica de la temperatura ambiental muestreada por EMCA Valdivia I y EMCA Las encinas. 126

Figura A10. Serie temporal histórica de la humedad relativa muestreada por EMCA Valdivia I y EMCA Las encinas. 126

Figura A11. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la estimación de concentración de los $MP_{10\text{wb}}$, $MP_{10\text{soa}}$ y $MP_{10\text{tr}}$ resueltos por AC junto a la concentración de $MP_{2,5}$ ambiental durante el 2019. 127

Figura A12. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la estimación de la concentración de MP_{10} atribuible al tráfico vehicular AC durante el 2019. 127

Figura A13. Serie temporal de validación de MLR de un mes aleatorio (Enero/2019) donde se muestran los niveles de monóxido de carbono ambientales medidos por la EMCA Valdivia I y los predichos por el MLR aplicado.....	128
Figura A14. Serie temporal de validación de MLR de un mes aleatorio (Septiembre/2019) donde se muestran los niveles de monóxido de carbono ambientales medidos por la EMCA Valdivia I y los predichos por el MLR aplicado... ..	128
Figura A15. Serie temporal de validación de MLR de un mes aleatorio (Marzo/2019) donde se muestran los niveles de monóxido de carbono ambientales medidos por la EMCA Valdivia I y los predichos por el MLR aplicado.	129
Figura A16. Diagrama de dispersión Hexbin de los residuos del modelo de regresión y la concentración ambiental de monóxido de carbono en todo el periodo modelado ..	129
Figura A17. Series temporales de las concentraciones obtenidas en AERMOD de monóxido de carbono utilizando diversas entradas de información meteorológica y distintos radios de integración de fuentes.	130
Figura A18. Series temporales de las concentraciones obtenidas en AERMOD de MP ₁₀ <i>Escape</i> utilizando diversas entradas de información meteorológica y distintos radios de integración de fuentes.	130
Figura A19. Salida del análisis de selección de variables tipo <i>forward</i> para el modelo de regresión lineal múltiple de estimación del CO emitido por el tráfico.	132
Figura A20. Salida del análisis de selección de variables tipo <i>Forward</i> para el modelo de regresión lineal múltiple de estimación del CO emitido por el tráfico (...).	133
Figura A21. Salida del análisis de selección de variables tipo <i>Backward</i> para el modelo de regresión lineal múltiple de estimación del CO emitido por el tráfico.	134
Figura A22. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración de CO _{tr} modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019.....	134
Figura A23. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración MP ₁₀ <i>Escape</i> modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019.	135
Figura A24. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración MP _{2,5} <i>Escape</i> modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019.	135

Figura A25. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración $MP_{2,5}$ *No-Escape* modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019. 136

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Inventario de emisiones AGIES considerando el 2013 como año base (MMA, 2017a).	9
Tabla 2. Resumen de valores de los criterios estadísticos utilizados para evaluar cada variable meteorológica de las configuraciones de WRF.	49
Tabla 3. Emisiones <i>Escape</i> anuales clasificadas según referencia, año base de estimación y tipo de contaminante.	55
Tabla 4. Emisiones <i>No-Escape</i> anuales clasificadas según referencia, año base de estimación y tipo de contaminante.	55
Tabla 5. Emisiones CO anuales clasificadas según referencia y año base de estimación.	57
Tabla 6. Valores promedio de concentración y contribución al MP _{2,5} de los distintos conglomerados resueltos para el año 2019.	60
Tabla 7. Valores promedio de concentración y contribución al MP ₁₀ de los distintos conglomerados resueltos para el año 2019,	61
Tabla 8. Contribución porcentual del material particulado total respirable y fino <i>Escape</i> y de <i>No-escape</i> a la concentración ambiental de contaminación medida por EMCA Valdivia I.	67
Tabla 9. Resumen del modelo de regresión logrado. El valor de significancia es de 95%. *p-valor<0,05. **p-valor<0.01.	68
Tabla 10. Resultados de la prueba de Durbin Watson para el modelo de regresión utilizado.	71
Tabla 11. Promedios de la concentración estimada para cada fracción de monóxido de carbono según estación del año para el año 2019.	73
Tabla 12. Resumen de los estadísticos de evaluación para los resultados de concentración promedio horaria, diaria y semanal de los aerosoles <i>Escape</i> modelados por AERMOD.	82
Tabla 13. Resumen de los estadísticos de evaluación para los resultados de concentración promedio horaria, diaria y semanal de los aerosoles <i>No-escape</i> modelados por AERMOD.	83

Tabla 14. Resumen de los estadísticos de evaluación para los resultados de concentración promedio horaria, diaria y semanal de monóxido de carbono modelado por AERMOD.....	84
Tabla 15. Resumen de los valores medios horarios material particulado <i>Escape</i> modelado en distintas estaciones del año junto a su contribución porcentual al material particulado ambiental.....	87
Tabla 16. Resumen de los valores medios horarios material particulado <i>No-escape</i> modelado en distintas estaciones del año junto a su contribución porcentual al material particulado ambiental.....	88
Tabla A1. Resultados de los estimadores de las regresiones lineales utilizadas en MLB.....	131
Tabla A2. Resumen de los permisos de circulación vehicular otorgados a vehículos motorizados en tres comunas de Chile durante el 2010 y 2019 según INE, 2021.....	136

LISTA DE ABREVIATURAS

MDCA: Modelo de dispersión de calidad del aire.

MODEM: Modelo de estimación de emisiones vehiculares.

MLR: Regresión lineal múltiple.

ALB: Análisis de líneas de borde.

SEA: Servicio de evaluación ambiental.

SMA: Superintendencia de medio ambiente.

MMA: Ministerio de medio ambiente.

PDA: Plan de descontaminación atmosférico.

PPDA: Planes de prevención y descontaminación atmosférica.

EMCA: Estación de monitoreo de calidad del aire.

SINCA: Sistema de información nacional de calidad del aire.

IEV: Inventario de emisiones vehiculares.

MODEM: Modelo de estimación de emisiones vehiculares.

IGU: Interfaz gráfica de usuario.

AERMOD: Modelo de dispersión de calidad de aire de la U.S. EPA

WRF: Modelo de investigación y pronóstico del tiempo

MMIF: Programa de interfaz del modelo de mesoescala de la U.S. EPA

CMB: Modelo de balance químico de masa de la U.S. EPA

CAMx: Modelo integral de calidad del aire

SECTRA: Secretaría de Planificación de Transporte

CALPUFF: Modelo de dispersión California Puff

CALINE: Modelo de dispersión de fuentes lineales California

SATURN: Modelo de Simulación y asignación de tráfico a redes viales urbanas

US EPA: Agencia de protección ambiental de los Estados Unidos

IE: Inventario de emisiones

Fac2: Estadístico de evaluación de modelos “Factor de dos”

RESUMEN

La contaminación atmosférica urbana provocada por el tráfico vehicular causa efectos nocivos sobre la salud poblacional. Por lo tanto, la implementación de herramientas que permitan cuantificar la contaminación vehicular permite desarrollar soluciones que apunten de forma eficiente y eficaz a controlar y prevenir la contaminación en zonas urbanas.

En Chile, los proyectos de gestión vial y transporte incorporan las externalidades ambientales generadas por medio del uso de modelos de dispersión de contaminantes. Sin embargo, el modelo actualmente utilizado a nivel nacional (CAMx) es ineficiente a escalas menores a 1-2 km, por lo que la aplicación y evaluación de otros modelos de dispersión de contaminantes vehiculares alternativos que busquen reproducir la variabilidad temporal y espacial de la contaminación emitida por el tráfico a escala urbana adquiere relevancia, especialmente a cortas distancias de las vías de tráfico.

El diseño metodológico de la presente investigación tiene como objetivo evaluar la utilización del modelo de dispersión *Gaussiano* AERMOD para simular la variabilidad temporal del $MP_{2,5}$, MP_{10} y CO emitidos por el tráfico vehicular durante el año 2019 en la ciudad de Valdivia, Chile.

El proceso de configuración y simulación de la dinámica del $MP_{2,5}$, MP_{10} y el CO fue realizado con AERMOD. La información meteorológica de entrada utilizada para la modelación fue simulada mediante la combinación de WRF-MMIF y datos empíricos de la estación de monitoreo Valdivia I. La información de emisiones fue extraída del inventario de emisiones vehiculares realizado por MODEM el año 2010. Las concentraciones de referencia de material particulado fino y grueso asociadas a la

contaminación vehicular fueron estimadas mediante la combinación de dos métodos de estimación de contaminantes basados en información empírica. Y, la evaluación del desempeño del modelo se realizó por medio herramientas de visualización y análisis estadístico de datos en lenguaje de programación R.

Los resultados de la evaluación del modelo indican que las concentraciones de MP_{10} y $MP_{2,5}$ de *Escape* simuladas por AERMOD subestimaron las concentraciones de referencia según los valores alcanzados de sesgo medio (MB) obtenidos en todos los escenarios de resolución temporal analizados y el análisis cualitativo realizado; no obstante, en el escenario de evaluación que considera una resolución temporal semanal estos contaminantes (MP_{10} y $MP_{2,5}$) presentaron altos valores de correlación de pearson y factor de dos ($r\text{-pearson}>0,45$ y $Fac2>0,50$, respectivamente). Nosotros creemos, que los deficientes resultados en las resoluciones horarias y diarias de los contaminantes mencionados anteriormente se deben principalmente a sesgos en el perfil temporal brindado por el inventario de emisiones vehiculares propuesto por MODEM, lo que hace que resultados a nivel diario y horario rigidos por estos perfiles temporales muestren un menor desempeño de predicción que los resultados a nivel semanal.

Por otro lado, para el caso del CO, el $MP_{10\ No\ Escape}$ y el $MP_{2,5\ No\ Escape}$ el análisis cuantitativo y cualitativo indican que AERMOD no reproduce bien la variabilidad temporal de estos contaminantes en ningún caso.

A modo de conclusión, nosotros encontramos que AERMOD muestra niveles de desempeño aceptable sólo para el material particulado total respirable y fino de contaminación de *Escape* promediado en una resolución temporal semanal, Sin embargo, nosotros también hallamos que la metodología de estimación de

concentraciones de referencia presenta un alto grado de incertidumbre, por lo que la evaluación de la modelo realizada es cuestionable y no es posible concluir de forma determinista sobre el mal desempeño de AERMOD para modelar contaminantes emitidos por el tráfico. Además, dado el buen desempeño meteorológico de WRF para Valdivia, se concluye que los resultados del desempeño de AERMOD están principalmente influenciado por la incertidumbre asociado a las emisiones y a la formulación del modelo.

ABSTRACT

Urban air pollution caused by vehicular traffic causes harmful effects on population health. Therefore, the implementation of tools that allow quantifying vehicular pollution allows the development of solutions that aim to efficiently and effectively control and prevent pollution in urban areas.

In Chile, road and transportation management projects incorporate environmental externalities generated through the use of pollutant dispersion models. However, the model currently used at the national level (CAMx) is inefficient at scales smaller than 1-2 km, so the application and evaluation of alternative vehicle pollutant dispersion models that seek to reproduce the temporal and spatial variability of pollution emitted by urban-scale traffic acquires relevance, especially at short distances from traffic lanes.

The methodological design of this research aims to evaluate the use of the Gaussian dispersion model AERMOD to simulate the temporal variability of $PM_{2.5}$, PM_{10} and CO emitted by vehicular traffic during 2019 in the city of Valdivia, Chile.

The process of configuration and simulation of the dynamics of the $PM_{2.5}$, PM_{10} and CO was carried out with AERMOD. The input meteorological information used for the modeling was simulated by combining WRF-MMIF and empirical data from the Valdivia I monitoring station. The reference of fine and coarse particulate matter associated with vehicular pollution was estimated by combining two methods. estimation of pollutants based on empirical information. And, the evaluation of the performance of

the model was carried out by means of visualization tools and statistical analysis of data in programming language R.

The results of the model evaluation indicate that the concentrations of PM₁₀ and PM_{2.5 Exhaust} simulated by AERMOD underestimated the reference concentrations according to the achieved values of mean bias (MB) obtained in all the temporal resolution scenarios analyzed (MB > 0) and the qualitative analysis carried out; However, in the evaluation scenario that considers a weekly temporal resolution, these pollutants (PM₁₀ and PM_{2.5}) presented high correlation values of pearson and factor of two ($r_{\text{pearson}} > 0.45$ and $\text{Fac2} > 0.50$, respectively). We believe that the deficient results in the hourly and daily resolutions of the aforementioned pollutants are mainly due to biases in the temporal profile provided by the vehicle emissions inventory proposed by MODEM, which makes results at a daily and hourly level governed by these temporal profiles show a lower prediction performance than the results at the weekly level.

On the other hand, in the case of CO, PM_{10 Non-Exhaust} and PM_{2.5 Non-Exhaust}, the quantitative and qualitative analysis indicates that AERMOD does not reproduce well the temporal variability of these pollutants in any case.

By way of conclusion, we found that AERMOD acceptable performance levels only for total respirable particulate matter and fine exhaust contamination averaged over a weekly temporal resolution, however, we also found that the reference concentration estimation methodology presents a high degree of uncertainty, so the evaluation of the model carried out is questionable and it is not possible to conclude deterministically on the poor performance of AERMOD to model pollutants emitted by traffic. In addition, given the good meteorological performance of WRF for Valdivia, it is concluded that the

results of the performance of AERMOD are mainly influenced by the uncertainty associated with emissions and the formulation of the model.

1. INTRODUCCIÓN

1.1 La contaminación atmosférica: Una problemática en múltiples escalas

La atmosfera terrestre es una mezcla principalmente constituida de gases que se estratifica en diferentes zonas según diversas variables físicas y químicas (e.g. presión, temperatura, densidad, entre otras). Esta mezcla heterogénea es constantemente atraída hacia el centro de la Tierra por la gravedad ejercida por nuestro planeta, y posee funciones vitales para el desarrollo de la vida. Su principal composición química en seco (sin considerar el vapor de agua) en los primeros 80 Km es relativamente constante, con un ~78% de N_2 , ~21% de O_2 y 0,9% de Ar. Además de esta composición, existen otras sustancias, en distintas capas características de la atmosfera que son consideradas contaminantes atmosféricos (e.g. NO_x , CO_2 , CH_4 , MP_{10}) y que pueden ser emitidos por fuentes antropogénicas (e.g. procesos de combustión industriales) o naturales (e.g. erupción de un volcán, erosión causada por el viento). Esta connotación, se debe principalmente a que su presencia sobre ciertos umbrales de concentración y exposición constituyen distintos riesgos para la salud poblacional y para la preservación del medio ambiente, como por ejemplo aumentar la probabilidad de contraer enfermedades cardiovasculares y suscitar el efecto invernadero, respectivamente (Seinfeld & Pandis, 2006). Esas especies también se caracterizan por la escala espacial que afectan (e.g. urbana o global), lo que depende de su tiempo de residencia en la atmosfera, determinado por los diversos procesos de remoción y transformación fisicoquímica que sufren una vez son emitidas (e.g. deposición seca) (Seinfeld & Pandis, 2006).

Si bien, en las últimas décadas el motor del interés en el desarrollo de la política ambiental a nivel mundial ha sido el cambio climático provocado por emisiones antropogénicas de gases de efecto invernadero (e.g. CO₂) (IPCC, 2006), varios estudios han logrado desagregar y demostrar la importancia de la contaminación atmosférica a escala local, cuantificando y caracterizando los efectos a la salud poblacional que causa la exposición a diferentes contaminantes emitidos por fuentes urbanas (Githeko & Woodward, 2003). Esto, sumado a la cantidad de personas que diariamente se exponen a la contaminación atmosférica en ambientes urbanos y a la creciente aglomeración demográfica urbana (e.g. aumento del número de megaciudades) (ONU, 2018), ha aumentado la preocupación internacional por los efectos de este tipo de contaminación en la salud humana. Por lo tanto, la caracterización de las distintas fuentes que emiten contaminantes en estas zonas adquiere relevancia, ya que permite proponer y desarrollar soluciones que apunten de forma eficiente y eficaz a estos problemas de escala urbana (Ayres et al., 2006; Sato & Yamamoto, 2005).

1.2 La contaminación urbana y el tráfico vehicular

Las emisiones antropogénicas de contaminantes atmosféricos son la principal causa de las condiciones de contaminación urbana (IPCC, 2014). Habitualmente, las fuentes antropogénicas que generan estas emisiones se clasifican según su naturaleza en: fuentes estacionarias (FE), móviles (FM) y fugitivas (FF). Las FE corresponden a fuentes de emisión situadas en un lugar determinado e inamovible, tales como: establecimientos industriales, comerciales, etc.; las FM se caracterizan por ser susceptibles a desplazarse, y por lo tanto corresponden a todos los vehículos de transporte que emiten contaminación a la atmósfera; y finalmente, las fuentes fugitivas

son consideradas como fuentes emisoras que comprenden emisiones que no se canalizan por ductos, chimeneas, tubos de escape, u otros sistemas similares hacia la atmosfera, un ejemplo de ellas es la suspensión de polvo provocada por el viento, actividades de construcción, actividades agrícolas o el tráfico vehicular (WRI, 2019).

En orden de complejidad, las emisiones más simples de caracterizarse son las producidas por FE. Esto, debido a sus propiedades intrínsecas (e.g. son inamovibles y con perfiles de actividad simples de estimar) que permiten cuantificar y detallar sus emisiones mediante diversas técnicas de medición experimental con una alta certeza (e.g. muestreo isocinético de chimeneas industriales) (EPA, 2021). Por otro lado, el estudio de FM es más complejo, y por lo general, en un dominio de caracterización de contaminación atmosférica urbana, requiere de la combinación modelos de estimación teóricos y métodos de muestreo empíricos (NCA, 2000). Las FM se subclasifican según la infraestructura vial que utilizan para transportarse en: FM fuera de ruta, que se caracterizan por desplazarse en caminos no pavimentados (e.g. Aviones, barcos, maquinaria agrícola); y FM en ruta, que lo hacen en carreteras o calles pavimentadas (e.g. buses, automóviles). Finalmente, las emisiones fugitivas (FF) son las que presentan mayores niveles de complejidad de estimación, debido a la alta dificultad de inclusión de métodos empíricos en el diseño experimental de estudios que pretenden estimar las emisiones provocadas por estas fuentes ya que en general son características por ser intermitentes (Onat, 2006).

Por otro lado, estudios han mostrado que la contaminación urbana no necesariamente proviene principalmente de fuentes estacionarias, indicando en algunos casos que las fuentes móviles aportan una parte importante de la contaminación

presente en una zona urbana (Künzli et al., 2000; Al-Jeelani, 2013; Han & Luke, 2006). En relación con estos hallazgos, en los últimos años se ha popularizado otro enfoque de clasificación utilizado para caracterizar y desarrollar estudios de emisiones de aerosoles vehiculares (e.g. MP_{10} y $MP_{2,5}$), categorizando las emisiones en: *No-Escape* y *Exhaust* (las cuales hacen referencia a los medios que utilizan las partículas y gases en el emitidos a la atmosfera producto del desplazamiento de los vehículos). Las primeras, corresponden a todas las emisiones indirectas provocadas por el tráfico vehicular, como por ejemplo, las emisiones causadas por la re-suspensión de polvo superficial provocada por el movimiento mecánico de vehículos en una calle; a su vez, ese polvo de calles consiste en una mezcla de emisión natural (polvo levantado por el viento y transportado a la calle más material biológico) más las emisiones de partículas provenientes del desgaste de frenos, neumáticos y carrocería de los vehículos que circulan por las vías. La segunda categoría corresponde a las emisiones asociadas de manera directa a los procesos de combustión que ocurren en el motor del vehículo, cuyos contaminantes se emiten principalmente por medio del tubo de escape, aunque pueden emitirse por otros medios (Charron et al., 2019; Ketzler et al., 2007; Pirjola et al., 2009; Padoan et al., 2018; Thorpe & Harrison, 2008; Pant & Harrison, 2008).

Es así, como la estimación de emisiones vehiculares, se considera como una fuente rica en información que sirve habitualmente para fortalecer la eficiencia de medidas asociadas a la incorporación del factor ambiental en proyectos de gestión vial (Dallmann & Harley, 2010). Además, la organización y clasificación de información de este tipo de emisiones ofrece la posibilidad de construir inventarios de emisión, los que

brindan información indispensable para la configuración y ejecución de modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos (MDCA) (SEA, 2012).

1.3 La contaminación vehicular en Chile

En Chile, para la estimación de emisiones vehiculares en ciudades con planes de transporte y de gestión de tránsito existe un sistema propuesto, desarrollado y elaborado por el Programa de Vialidad y Transporte Urbano SECTRA con un enfoque *bottom-up*, es decir, que las estimación de emisiones se realiza para cada fuente vehicular, a diferencia del enfoque *top-down* que estima las emisiones a un nivel de escala mayor (e.g. Regional o Nacional) que el estudiado y luego con una metodología de desagregación, se estiman las emisiones de las fuentes. Este sistema estima las emisiones con una resolución temporal anual y tiene por finalidad la generación de inventarios de emisiones vehiculares. El sistema se denomina, modelo de cálculo de emisiones vehiculares (MODEM) (DICTUC, 2010).

MODEM, realiza las estimaciones combinando métodos empíricos de medición de actividad vehicular (frecuencia de vehículos en distintas vías) con modelos teóricos de transporte (TRANSYT y SATURN). La elección del modelo de transporte utilizado depende del tamaño y la complejidad del parque vehicular analizado. MODEM agrupa en arcos “equivalentes” las vías de tránsito, para optimizar los tiempos de modelación computacional y considera diferentes tipos de emisiones vehiculares, entre ellas: emisiones calientes, provenientes del tubo de escape de los vehículos; emisiones de partidas en frío, producidas cuando el proceso de combustión en el motor se realiza en condiciones de temperatura inferiores a las normales del diseño del vehículo (cuando comienza a desplazarse); emisiones evaporativas, principalmente provenientes de la

fuga de hidrocarburos volátiles del motor o del dispositivo de carga de combustible; emisiones del desgaste de frenos y neumáticos, provenientes de la operación de los vehículos propiamente tal; y finalmente, emisiones de la resuspensión de polvo de las calles, provocadas por la circulación de vehículos sobre las vías de tránsito (las primeras dos son *'Escape'* mientras que las últimas tres son de la categoría *'No-escape'*). Existen algunas especies que no se contemplan en ciertas emisiones específicas en MODEM; por ejemplo, para el caso del monóxido de carbono, el modelo no estima las emisiones de resuspensión de polvo debido a que este tipo de emisiones sólo incluye partículas contaminantes. Por otro lado, para el caso de las emisiones evaporativas, no se consideran los aerosoles, debido a que este tipo de emisiones es característica de especies químicas volátiles (e.g. Hidrocarburos volátiles). Dentro de los principales contaminantes característicos de las FM en ruta asociados a las emisiones descritas anteriormente se encuentran: Material particulado fino y grueso (MP_{10} $MP_{2,5}$); monóxido de carbono (CO); hidrocarburos volátiles (HC); y óxidos de nitrógeno (NO_x) (DICTUC, 2010).

En relación con lo expuesto anteriormente sobre la clasificación de emisiones vehiculares, la información de MODEM también permite caracterizar la contaminación especificada en emisiones *Escape* y *No-escape*, donde las emisiones calientes y frías corresponden a *Escape*, mientras que las emisiones evaporativas, del desgaste de frenos y neumáticos y de la resuspensión de polvo se pueden considerar como *No-escape*. En la presente investigación se agrupó la información de emisiones vehiculares según esta clasificación para efectos prácticos y acordes al diseño metodológico explicado en la Sección 3.1.4.

Adicionalmente a MODEM, existe un marco de trabajo (framework) propuesto por SECTRA para evaluar las externalidades ambientales generadas por la implementación de un proyecto o plan de transporte denominado “*Metodología para evaluación económica de los cambios en emisiones vehiculares*” (MODEC), el cual se utiliza a nivel nacional. Esta metodología, es un sistema de modelación de externalidades sociales, compuesto por distintos componentes que cuantifican y valoran el impacto ambiental de proyectos de gestión vial sobre un cierto dominio geográfico utilizando la información de MODEM y el modelo meteorológico WRF, un modelo de pronóstico meteorológico diseñado para fines técnicos (e.g. pronosticar episodios de alta o baja presión atmosférica) e investigativos (e.g. estudiar fenómenos atmosféricos afectados por la meteorología), para alimentar un modelo de dispersión de contaminantes (DICTUC, 2010). El modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos utilizado en MODEC se denomina CAMx. Este, es un modelo fotoquímico tridimensional de tipo euleriano, capaz de estimar la variabilidad espacial y temporal de contaminantes primarios y secundarios a escala regional, ejecutado y configurado en el ambiente del sistema operativo LINUX (ENVIRON, 2009).

Debido a sus características, CAMx es un modelo complejo de configurar y ejecutar, y, además, exige grandes requerimientos computacionales e información detallada para realizar los procesos de simulación. Esto sugiere que no es viable utilizarlo para estimar concentraciones de contaminantes en un dominio geográfico pequeño, ya que requiere una gran cantidad de información de entrada con un gran nivel de detalle para ejecutarlo correctamente y lograr caracterizar la contaminación en distintos puntos de una ciudad. Por esta razón, es interesante evaluar y estudiar nuevos

modelos que potencialmente puedan realizar esta tarea de forma eficaz, eficiente, y que, además, sean más simples de configurar y ejecutar.

1.4 El caso de Valdivia: Una ciudad del sur de Chile.

Valdivia, es una ciudad ubicada en la XIV región de Los Ríos, Chile. Se encuentra localizada entre dos importantes acuíferos superficiales, el río Calle-Calle y el río Valdivia a 841 Km de Santiago, capital de Chile; y a 164 Km Temuco, La Araucanía. Esta ciudad posee una superficie total aproximada de 10 km² con una población creciente de más de 10.000 habitantes (MMA, 2014). Entre los ecosistemas naturales de la provincia de Valdivia, destaca la Selva Valdiviana que alberga diversas especies endémicas. Esta condición, ha obligado a establecer zonas protegidas naturales como el Parque Oncol, Parque Alerce Costero, La Reserva Costera Valdiviana, entre otros (MMA, 2014). En Valdivia, operan dos estaciones de monitoreo de calidad de aire (EMCA) pertenecientes a la red SINCA, que cuantifican de forma continua la concentración de diversos contaminantes normados (MP_{2,5}, MP₁₀, CO, SO₂ y N₂O) y también algunas variables meteorológicas (velocidad del viento, dirección del viento, temperatura ambiental y humedad relativa). Dichas estaciones son: Valdivia I que comenzó sus operaciones el año 2008 y Valdivia II que las inicio en el año 2018 (SINCA, 2021).

Valdivia el año 2014, fue declarada zona saturada por contaminación de material particulado fino y total respirable (MP_{2,5}, MP₁₀), por lo que el año 2017 se estableció mediante el decreto 25, elaborado por el Ministerio de medio ambiente, el Plan de descontaminación atmosférica de la ciudad de Valdivia (PDA Valdivia) (MMA, 2017a).

Dentro del PDA Valdivia se consideraron medidas para atenuar la contaminación producida por las fuentes móviles en ruta y fuera de ruta. Esto, debido al aporte al total de emisiones de la Ciudad según el inventario de emisiones propuesto en el análisis general de impacto económico y social del PDA de Valdivia (MMA, 2015b) mostrado en la **Tabla 1**. Como dato adicional con respecto a las fuentes móviles, al año 2019, según INE, 2020 la comuna ciudad de Valdivia cuenta con 47.030 permisos de circulación vehicular otorgados alcanzando un crecimiento de 10,2% con respecto al año 2010 (42.677) (Ver Anexos, Tabla A2).

Tabla 1. Inventario de emisiones AGIES considerando el 2013 como año base (MMA, 2017a).

SECTOR	EMISIONES (ton/año)					
	MP10	MP2,5	SO ₂	NO _x	NH ₃	CO
Residencial	7.375	7.171	55	359	304	178.457
Quemas e incendios forestales	22	21	1	7	0	128
Fuentes fijas	439	376	293	670	0	292
Móviles en ruta	16	15	3	490	11	704
Fugitivas	282	41	0	0	0	0
TOTAL	8.134	7.624	352	1.526	316	179.581

Las principales medidas que se consideraron a cumplir en la realización del PDA con respecto a esta fuente emisora fueron: la renovación de buses del transporte público y la implementación de un nuevo método de medición de emisiones vehiculares en centros de revisión técnica (*Acceleration Simulation Mode*) (MMA, 2017a).

En este contexto, la ciudad de Valdivia se transforma en un dominio idóneo para evaluar la implementación de modelos de dispersión a escala local que puedan brindar información de la dinámica de la contaminación vehicular en distintas zonas de la Ciudad utilizando la información existente del inventario de emisiones elaborado por MODEM, esto debido a la deficiente calidad de aire existente en la ciudad; sus dimensiones que la definen dentro del marco de la escala local; la importancia de la biodiversidad aledaña; y la creciente población afectada. Considerando esto, es necesario entregar antecedentes generales de los modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos disponibles que potencialmente podrían implementarse en la ciudad para este fin.

1.5 Modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos

En los últimos años el desarrollo tecnológico ha incentivado a investigadores, organizaciones medioambientales y entidades estatales a proponer, usar o desarrollar modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos (MDCA). Estos, son modelos deterministas capaces de cuantificar los impactos en el componente aire involucrados en una determinada alteración al medioambiente, estimando la variabilidad espacial y temporal de un contaminante en un dominio geográfico establecido por medio de algoritmos computacionales (Holmes & Morawska, 2006). El enfoque de estos modelos es emular la dinámica de especies contaminantes una vez emitidas a la atmosfera; lo que los diferencia a modelos matemáticos estadísticos utilizados en las ciencias atmosféricas (e.g. modelos de reparto de fuentes, modelos de regresión), ya que estos se centran en la información de la contaminación cuantificada en el receptor (empírica), mientras que los MDCA utilizan información de las fuentes emisoras junto a información meteorológica y topográfica para realizar la estimación en un punto o área geográfica.

Si bien, generalmente los modelos estadísticos suelen ser más precisos que los MDCA, debido a que incluyen en su diseño experimental información empírica de contaminación, los modelos de dispersión son extremadamente útiles, ya que pueden estimar la contaminación en zonas ausentes de sistemas de monitoreo de calidad del aire (diagnostico) y en ocasiones, se aplican en diversos sistemas de pronóstico de calidad del aire en zonas urbanas contaminadas (Holmes & Morawska, 2006; Hopke, 2016). Un ejemplo concreto de su uso en Chile es su utilización habitual para cuantificar la alteración asociada a la matriz aire en estudios de impacto ambiental (EIA) de proyectos que generan efectos significativos sobre el medioambiente definidos en la legislación ambiental chilena (SEA, 2012).

La información de entrada básica para el funcionamiento de cualquier MDCA se clasifica en: meteorológica, topográfica y de emisiones atmosféricas. Los inventarios de emisiones, generalmente se utilizan para incorporar la información de emisiones a un MDCA, mientras que la información meteorológica frecuentemente es obtenida mediante sistemas de monitoreo y sondeo meteorológico empíricos o en ocasiones, utilizando modelos computacionales (e.g. WRF, CALMET). Por último, la información topográfica habitualmente es obtenida a través de bases de datos satelitales de uso de suelos y elevación de terreno (e.g. STRM1 y USGS). El detalle de la información necesaria para el funcionamiento básico de un MDCA también depende de sus funcionalidades y características, por ejemplo, los modelos fotoquímicos requieren información de la especiación y reactividad química adicional para su funcionamiento básico (SEA, 2012).

Todos los MDCA parten de un nexo común, que es la expresión matemática que describe la dinámica de una especie contaminante en una parcela de aire de un volumen determinado (dV). Esta expresión, denominada en ocasiones como la Ecuación fundamental de la química atmosférica o ecuación de continuidad, es el resultado de la aplicación del principio de conservación de la materia sobre una parcela de aire que contiene la especie contaminante. La cual se muestra a continuación (Seinfeld & Pandis, 2006):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (c \vec{V}) + R - S \quad (\text{Ec. 1})$$

Donde “ c ” es la concentración del contaminante en el volumen de aire, \vec{V} es el vector de velocidad de viento; “ R ” corresponde a todos los procesos de generación química de la especie en la parcela de aire; y “ S ” a todos los procesos fisicoquímicos de remoción del contaminante. En esta expresión, el gradiente del producto de “ c ” y “ \vec{V} ” representa a los procesos de advección que generan las corrientes de viento sobre la especie en las distintas dimensiones del espacio e incluye el transporte *turbulento* (aleatorio) y *adectivo* generado en la atmósfera. En este contexto, considerando la directriz principal de la investigación relacionada con la búsqueda de un sistema que incluya un MDCA y cumpla con las características mencionadas anteriormente, es que surgen como posibilidad los modelos clásicos de dispersión de contaminantes *Gaussianos*.

La descripción matemática y el enfoque clásico de los MDCA corresponde a la parametrización *Gaussiana* de los procesos de transporte turbulento de la especie contaminante. Esta, se caracteriza por describir el transporte *turbulento* de la ecuación

de continuidad según la ley de Fick (Ley de difusión molecular) (Venkatram, 1993; Arya, 1999):

$$J_m = -K_x \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x} - K_y \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial y} - K_z \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial z} \quad (\text{Ec. 2})$$

Donde J_m corresponde al flujo de masa del contaminante mientras es advechado por un campo de viento turbulento y K es el coeficiente de difusión turbulento en cada coordenada del espacio (análogo a los coeficientes de difusión molecular). En esta expresión, es relevante el sistema de coordenadas que utilizan los modelos *Gaussianos*, donde la coordenada “x” queda definida por la dirección del viento, la coordenada “y” corresponde a la horizontal perpendicular a la dirección del viento y “z” a la altura. Utilizando la analogía de la segunda ley de Fick y considerando que se emite una masa A del contaminante en el origen de las coordenadas desde $t=0$ en adelante, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden. La solución analítica de un MDCA *Gaussiano* a dicho sistema se muestra en la siguiente expresión (Crank, 1986; Clussler, 1984):

$$\langle c \rangle (x, y, z, t) = \frac{A}{2\pi (K_x K_y K_z)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{4t} \left(\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{z^2}{K_z}\right)\right) \quad (\text{Ec. 3})$$

Esta expresión representa la concentración media del contaminante en toda posición y tiempo para un modelo de este tipo. Luego, desarrollando esta expresión y aplicando diversos supuestos para simplificar los procesos de cálculo se obtiene la ecuación que describe la variabilidad espacial de la concentración media de la especie contaminante según un MDCA *Gaussiano* (Jorquera, 2015):

$$\langle c \rangle (x, y, z) = \frac{Q}{2\pi \langle V \rangle \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \left[\exp\left(-\frac{(z-h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) \mp \exp\left(-\frac{(z+h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (\text{Ec. 3})$$

Donde h_e corresponde a la altura efectiva de emisión desde donde comienza la formación del penacho y σ representa a los coeficientes de dispersión Gaussianos (Correspondientes a la desviación estándar de una distribución Gaussiana) obtenidos a partir de los coeficientes de difusión. Esta ecuación gobierna la simulación de este tipo de MDCA, ya que describe los fenómenos turbulentos con distribuciones gaussianas e incorpora la advección del viento. Cabe señalar, que, dentro de esta expresión, también se consideran los efectos del terreno en los procesos de dispersión en el factor exponencial del extremo derecho de la ecuación que se adiciona o se resta dependiendo del caso (e.g. tipo de suelo).

Dentro de los principales supuestos de los modelos Gaussianos se encuentra (Jorquera, 2015):

- Las emisiones se realizan de manera continua o en periodos de tiempo mayores que los del transporte hacia el receptor de interés (aproximación de $\sigma_x \approx 0$).
- La especie modelada no reacciona químicamente en el periodo modelado (e.g. CO y MP₁₀ en 1 hora, el cuál es el período de modelación).
- Su tiempo de sedimentación es relativamente alto (e.g. MP₁₀).
- La dispersión en el eje “y” y “z” posee una distribución gaussiana.
- En el periodo de modelación (e.g. intervalos de 1 hora), las condiciones de estabilidad atmosférica no varían.
- Ausencia de periodos de calma de viento (velocidad < 0,1 m/s).

- La dispersión vertical y horizontal sólo depende de la distancia de propagación del penacho en la coordenada “x”.

1.6 AERMOD: Una posible alternativa propuesta por la U.S. EPA

En la actualidad, existen diversos sistemas de modelación que utilizan el tipo de parametrización *Gaussiana* para simular los procesos de dinámica de contaminantes en la atmosfera. Adicional a esta funcionalidad, el propósito de la presente investigación es realizar la simulación de dispersión específicamente para fuentes móviles en ruta. En este escenario, es donde surge como posibilidad el uso de un modelo utilizado a nivel mundial (incluyendo a Chile) denominado AERMOD (*Air Quality Dispersion Modeling*). AERMOD es un modelo desarrollado y soportado por la U.S. EPA y utilizado para simular la dispersión de contaminantes emitidos principalmente por fuentes puntuales. A diferencia de la formulación *Gaussiana* clásica, AERMOD posee funciones para considerar procesos de remoción de contaminantes tales como deposición seca y húmeda. Este sistema de modelación dispone de tres grandes procesadores de información: AERMET, para configurar, validar y procesar datos de entrada meteorológicos, empleando teoría de turbulencia atmosférica más avanzada que el caso Gaussiano clásico; AERMAP, para configurar datos de entrada topográficos y extender la teoría *Gaussiana* clásica a terreno real (no plano); y AERMOD, para incluir las emisiones atmosféricas (incluyendo mediciones en fuentes industriales), incorporar la información procesada por los otros componentes, ejecutar la simulación y configurar la información de salida (EPA, 2018).

Adicional a su funcionamiento tradicional de modelación de fuentes puntuales, AERMOD a través del tiempo también ha incorporado formulaciones que permiten

modelar fuentes lineales (utilizadas para modelar fuentes móviles en ruta), de área y volumétricas (principalmente para fuentes fugitivas), tal como lo han hecho otros sistemas de modelación, como por ejemplo CALPUFF con la integración del modelo CALINE en sus distintas versiones (Heist et al., 2013).

Como se ha mencionado anteriormente, dentro de los MDCA desarrollados hasta el momento, los que utilizan un sistema de parametrización *Gaussiano* son los más simples, y debido a sus limitaciones sólo funcionan óptimamente bajo ciertas condiciones específicas (campo de vientos estacionario y uniforme, por ejemplo). Sin embargo, la ventaja que poseen radica en la información de entrada que requieren, ya que esta es relativamente fácil de conseguir y la configuración, calibración y optimización de estos sistemas de modelación es más simple de gestionar debido a que existen interfaces gráficas de usuario que los soportan y el procesamiento asociado es menos complejo. Por esta razón, es interesante evaluar y estudiar este modelo como potencial MDCA para estimar la dinámica de contaminantes vehiculares.

En este contexto, surge la pregunta central que pretende responder la presente investigación: ¿AERMOD, un modelo local de dispersión de contaminantes atmosféricos es capaz de estimar la variabilidad temporal del $MP_{2,5}$, MP_{10} y CO emitido por fuentes vehiculares en la ciudad de Valdivia basándose en la evaluación del modelo utilizando indicadores estadísticos que habitualmente se utilizan en esta tarea comparando los resultados de obtenidos en la modelación con un set de datos de referencia?

Hipótesis:

El uso del sistema de modelación AERMOD con datos de emisión de MODEM y monitoreo ambiental, permite reproducir de buena forma las concentraciones ambientales de $MP_{2,5}$, MP_{10} y CO atribuibles a vehículos motorizados con un grado de correlación de Pearson mayor o igual a 0,40 y un factor de dos mayor o igual a 0,50, con respecto a los datos de referencia.

Objetivo General:

Evaluar el desempeño del modelo de dispersión AERMOD para simular la variabilidad temporal del MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO producido por el tráfico vehicular durante el año 2019 en la ciudad de Valdivia, Chile.

Objetivos específicos:

1. Implementar AERMOD para la ciudad de Valdivia, utilizando la información de emisiones del tráfico, definidas en MODEM para la red vial, y resultados de WRF como entrada de datos meteorológicos de la ciudad.
2. Estimar los niveles de contaminación de referencia mediante la aplicación de información de monitoreo y modelos de reparto de fuentes, y contrastarlos con los resultados obtenidos por el modelo de dispersión utilizado (AERMOD)
3. Analizar e interpretar las diferencias entre los resultados de contaminación simulados y los datos de referencia.
4. Proponer, en base al análisis y discusión de los resultados, mejoras al sistema de modelación integrado y posibles causas del sesgo del modelo.

2. METODOLOGÍA

Se realizaron simulaciones de dispersión del MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO emitido por fuentes vehiculares con el sistema de modelación AERMOD durante el año 2019 en la ciudad de Valdivia, Chile, utilizando diversas configuraciones del modelo de dispersión. Los resultados de las simulaciones se compararon con la información de referencia obtenida del análisis empírico de estimación de MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO emitido por fuentes vehiculares, basado en la combinación de modelos de reparto y análisis de conglomerados de fuentes descrito en Jorquera & Villalobos, 2020.

Para llevar a cabo la modelación y configuración de AERMOD, se utilizó la interfaz gráfica de usuario (IGU) Aermodview V.9.9 desarrollada y soportada por *Lakes Environmental*. Está IGU permite aplicar los distintos componentes del sistema de modelación AERMOD dentro de un mismo ambiente computacional, facilitando el trabajo del usuario mediante herramientas de visualización y procesamiento de información (Lakes Environmental, 2012).

El algoritmo empleado fue una combinación de metodologías de investigación utilizadas en estudios previos y aplicación de normas de estimación de calidad del aire (Schmitz et al., 2011; Chang & Hanna, 2004; Hopke, 2016; MMA, 2013). El trabajo se dividió en cuatro estadios secuenciales: 1. Procesamiento de datos de entrada al sistema de modelación AERMOD (1° Estadio); 2. Modelación del MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO emitido por fuentes vehiculares (2° Estadio); 3. Levantamiento de datos de referencia de MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO emitido por fuentes vehiculares (3° Estadio); y 4. Evaluación de los resultados modelados (4° Estadio).

La descripción de cada uno los estadios se presentan y estratifican de manera organizada en los siguientes subcapítulos de la presente unidad.

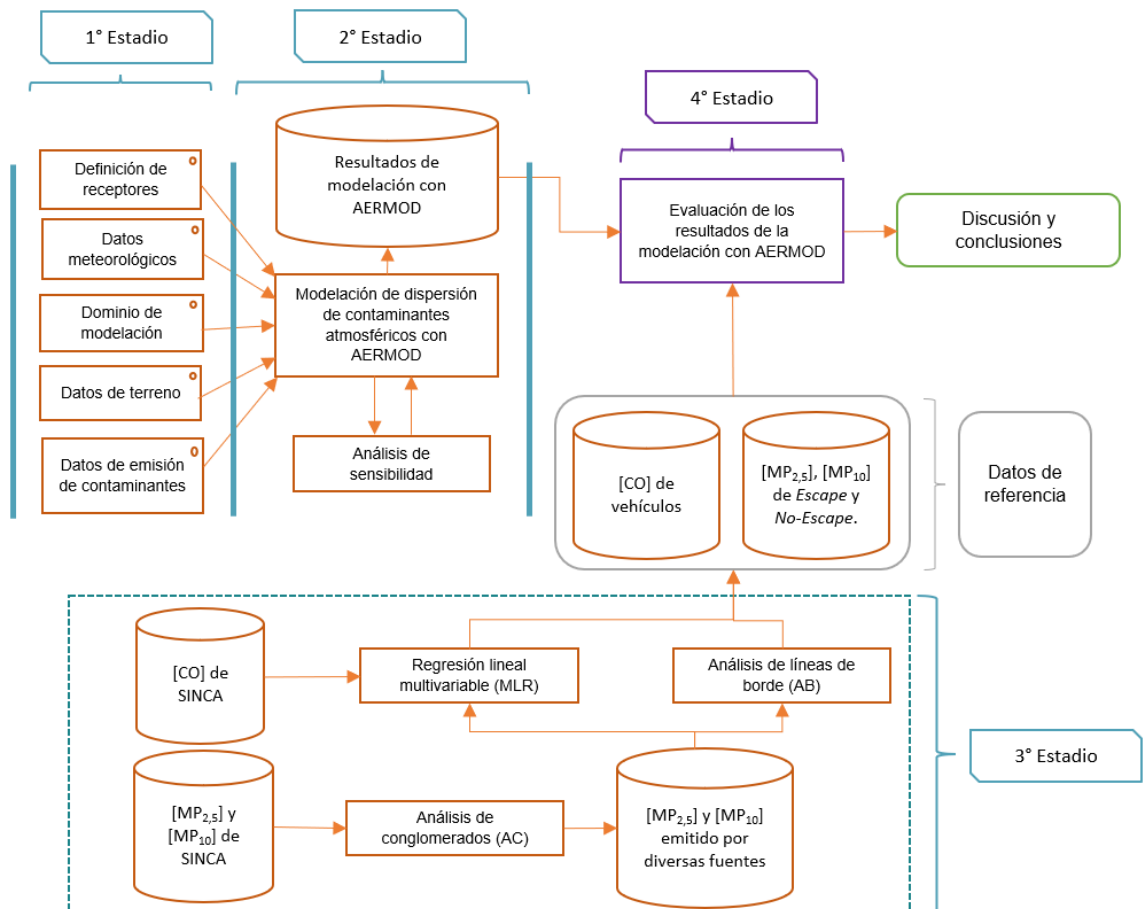


Figura 1. Diagrama de flujo general del diseño metodológico del estudio.

2.1 Procesamiento de datos de entrada (1° Estadio)

La mayoría de los modelos computacionales requieren datos de entrada para estimar, predecir y explicar fenómenos. Desde modelos complejos de *machine learning* para procesamiento de imágenes (Angra & Ahuja, 2017) hasta el clásico modelo de regresión lineal simple (Myers, 1990).

Los MDCA requieren cuatro insumos para su funcionamiento básico; la definición de receptores y el dominio de modelación, datos meteorológicos representativos de la zona de modelación, información de emisión de fuentes de los contaminantes estudiados; e información del terreno del área de modelación (Holmes & Morawska, 2006). La obtención y el procesamiento de cada uno para su integración en el sistema de modelación es descrita a continuación.

2.1.1 Definición de receptores y dominio de modelación

Se definió un receptor cartesiano en las coordenadas (651593 E, 5589460 N; 18-H). Este lugar geográfico, es también la ubicación de la EMCA Valdivia I de la red SINCA, con la motivación de realizar la evaluación de los resultados de AERMOD, ya que en dicha estación se monitorea continuamente la calidad del aire en Valdivia.

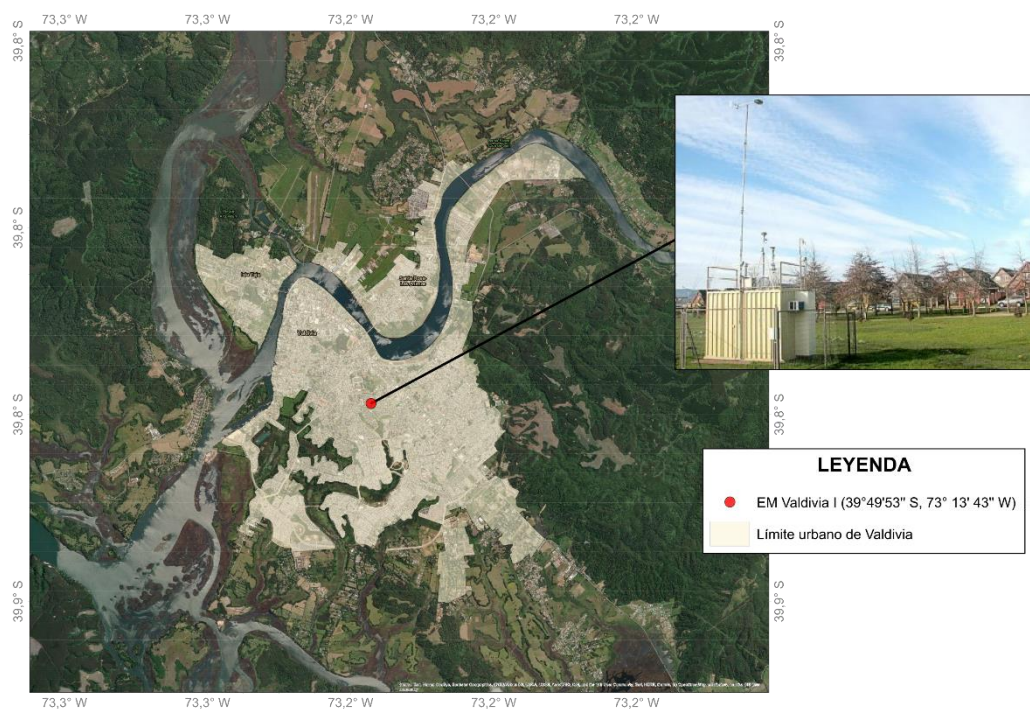


Figura 2. Cartografía de la ciudad de valdivia y el receptor utilizado en la modelación.
(Fuente: Elaboración Propia)

La EMCA Valdivia I se ubica en el interior del Parque Kraemer, en la ciudad de Valdivia, rodeada de vegetación. Este, es el principal sitio de monitoreo público de calidad del aire en la ciudad y el más antiguo, iniciando sus operaciones en enero del año 2008.

Valdivia I tiene una representatividad de 2 Km a la redonda en términos de normativa, donde abarca parte importante de la red vial de la ciudad incluyendo importantes vías transitadas por vehículos situadas en el centro de la ciudad. En Valdivia I, se monitorean a nivel horario MP_{10} , MP_{25} , NO_2 , SO_2 , y CO , de los cuales fueron estudiados MP_{10} , MP_{25} y CO ; y variables meteorológicas, como la humedad relativa, velocidad del viento, dirección del viento y temperatura ambiental.

El dominio de modelación fue establecido en un área cuadrangular total de 10x10 Km, el que incorpora todos los potenciales receptores, fuentes emisoras y datos de terreno que se ingresaron al sistema de modelación AERMOD.

2.1.2 Información del terreno

La información topográfica del dominio de modelación fue obtenida de la base de datos de la misión topográfica *Shuttle Radar Topography Mission* (STRM1) con una resolución de un metro cuadrado.

La información relacionada con el uso de suelos del dominio fue conseguida a través de los archivos *Global Land Cover Characterization* (GLCC) publicados por el *U.S Geological Survey* (USGS).

Toda la información de terreno fue configurada y procesada en el componente AERMAP de AERMOD, un módulo del modelo de dispersión especializado en el preprocesamiento de información de terreno. Los principales parámetros abordados por el procesamiento de datos de terreno fueron:

- Longitud de rugosidad superficial (m): Parámetro que representa la rugosidad de la superficial.
- Relación de Bowen (adimensional): Parámetro que representa la proporción del tipo de transferencia de calor de la superficie a la atmosfera.
- Albedo terrestre (adimensional): Porcentaje de radiación que refleja la superficie del dominio con respecto a la radiación que recibe.
- Uso de suelos (categórica): Información del material físico en la superficie de la tierra en el dominio analizado.

- Elevación del terreno (m): Información de la altura sobre el nivel del mar de la superficie de la tierra con respecto al nivel del mar en el dominio analizado.

2.1.3 Datos meteorológicos del periodo y el área modelada

Los datos meteorológicos en altura fueron obtenidos aplicando el modelo computacional *Weather Research and Forecasting* (WRF), versión 4.2. Estas modelaciones fueron realizadas por el grupo de investigación del profesor Jorquera y traspasadas al alumno. Los datos meteorológicos superficiales se obtuvieron, entonces, de dos fuentes: de la meteorología modelada por WRF y de la observada en la EMCA Valdivia I de la red SINCA.

La información meteorológica modelada por WRF fue generada a partir de dos configuraciones diferentes y la evaluación de sus archivos meteorológicos superficiales permitió escoger la configuración más representativa de las condiciones de campo (esto se detalla más adelante en la sección 5.1 de los resultados.).

Los archivos meteorológicos *output* generados por WRF fueron procesados por el software *The Mesoscale Model Interface Program* (MMIF) versión 3.4.1. El software MMIF fue dispuesto en dos configuraciones distintas; una compatible con AERMOD y la otra con AERMET. La primera permite obtener directamente los dos archivos meteorológicos (superficie y altura) de entrada al modelo AERMOD, mientras que la segunda permite mezclar observaciones superficiales con datos modelados en altura con WRF (no observados), es decir, generando una meteorología híbrida.

MMIF configurado para AERMET generó siete archivos de salida, tres de ellos fueron usados para pre-procesar datos en el componente del modelo, los demás fueron archivos de reporte del proceso. Estos tres, se describen a continuación:

- Archivo de meteorología “aersurface” (.sfc): Contiene datos de variables meteorológicas modeladas por WRF en superficie.
- Archivo meteorológico “onsite” (.dat): Contiene información meteorológica detallada modelada a distintas alturas.
- Archivo de meteorología “Upper air” (.fsl): Contiene información meteorológica simplificada modelada a distintas alturas.

Como ya se ha mencionado, MMIF configurado para AERMOD generó dos archivos de salida (*outfiles*) listos para ser incorporados en este componente, sin necesidad de utilizar el componente AERMET del sistema de modelación. Es decir, esta meteorología es totalmente modelada. Los dos generados por el software se describen a continuación (ambos son requeridos para poder correr el modelo AERMOD).

- Archivo de meteorología “aersurface” (.sfc): Contiene datos de variables meteorológicas modeladas por WRF en superficie.
- Archivo meteorológico en altura (.pfl): Contiene información meteorológica modelada del perfil atmosférico pre-procesada (simplificada) para ser incorporada en el componente principal de AERMOD.

Para la segunda opción de generación de archivos meteorológicos, empleando datos observados de superficie, se procesó la información meteorológica superficial muestreada por la EMCA Valdivia I, en conjunto con la información meteorológica en altura generada por la configuración más representativa de WRF, a través del componente AERMET. A partir de esto, se generaron dos posibles configuraciones de meteorología compatibles para AERMOD; una utilizando información meteorológica de altura del archivo “. onsite” y otra con la información del archivo “.dat”.

En resumen, se obtuvieron tres configuraciones de información meteorológica del análisis; dos configuraciones híbridas, con datos empíricos (superficiales) de la EMCA Valdivia I y datos modelados (en altura) por WRF; y una 100% modelada con WRF.

2.1.4 Fuentes de emisión de contaminantes

La información de emisión de MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO emitido por fuentes vehiculares se extrajo del inventario de emisiones vehiculares en la ciudad de Valdivia. Este inventario, fue producto de la implementación del modelo de estimación de emisiones vehiculares MODEM en la red vial de Valdivia (DICTUC, 2010). Del inventario de emisiones se seleccionó la información relacionada al monóxido de carbono (CO), el material particulado total respirable (MP_{10}) y el material particulado fino (MP_{25}). En el caso de los aerosoles, la información del inventario permitió distinguir entre dos tipos de emisiones vehiculares, las emisiones por el tubo de escape (*Escape*) y las emisiones de polvo resuspendido de las calles (*No-escape*). La información de emisiones consistió en bases de datos en las que se encuentra: información de emisión vehicular en [ton/año] de cada uno de los arcos de la red vial, para cada tecnología vehicular; información geográfica de cada arco y nodo; perfil de flujo semanal, para cada tipo de vehículo en cada una de las zonas vehiculares definidas en DICTUC, 2010 para la ciudad de Valdivia. De manera que, la inclusión de las emisiones vehiculares del inventario en el sistema de modelación requirió una depuración, organización y transformación de los datos (*Data Wrangling*). Este procesamiento de datos se realizó utilizando el lenguaje de programación R con los módulos *dplyr*, *readr* y algunas funciones bases del lenguaje. A continuación, se presenta un esquema general que resume el proceso de limpieza de datos (**Figura 3**) y una cartografía que muestra las zonas y arcos establecidos en la

implementación de MODEM (**Figura 4**). Cabe hacer notar que los ‘arcos modelados’ por MODEM no son necesariamente coincidentes con las calles de la red vial de Valdivia, sino más bien corresponden a ‘segmentos equivalentes’ que conectan distintas zonas de la ciudad, satisfaciendo la demanda por viajes que se ha recopilado mediante encuestas origen-destino (EOD) realizadas en la misma ciudad. Algunos de esos segmentos coinciden geográficamente con calles, pero otros no (Figura 4).

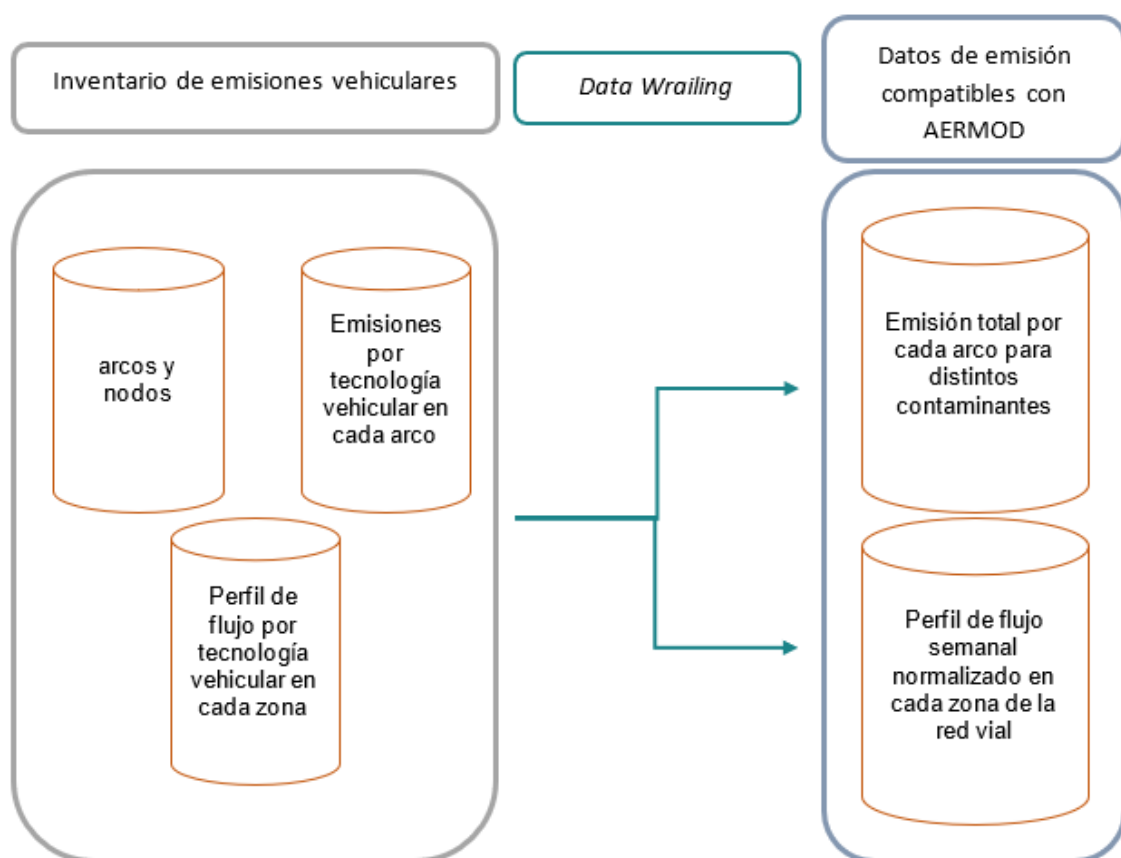


Figura 3. Esquema general del preprocesamiento de datos de emisión de MP_{10} , MP_{10} y CO producido por fuentes vehiculares.

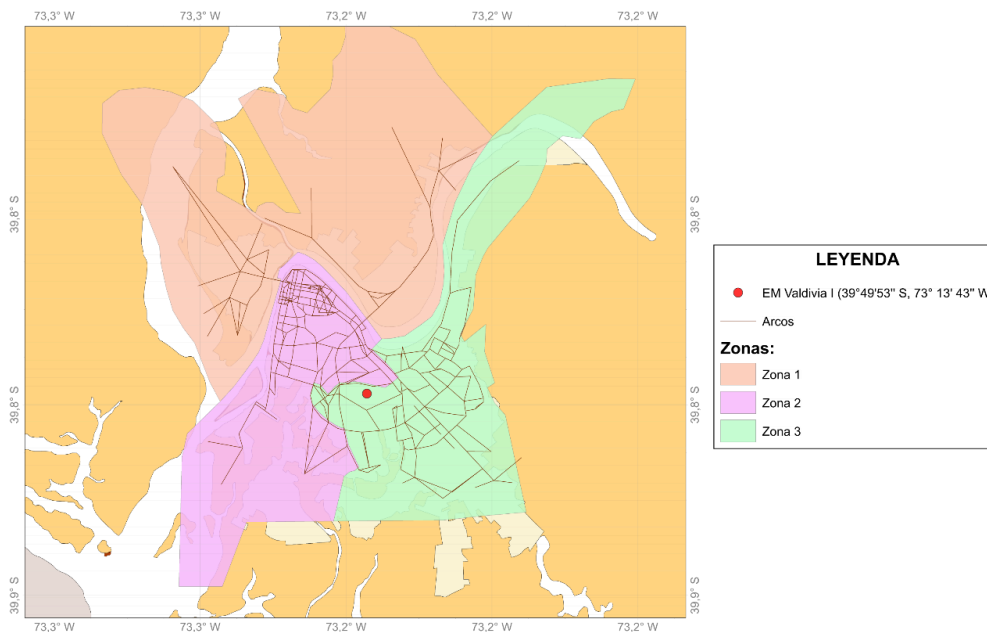


Figura 4. Representación de la red de arcos y zonas definidas en MODEM para la ciudad de Valdivia (Fuente: Elaboración Propia).

Luego de la depuración, los datos fueron configurados dentro del componente principal del sistema de modelación, utilizando fuentes lineales en AERMOD, con una altura de inicio de dispersión vertical (σ_z) de 1 metro, para representar cada arco del inventario y la función de emisión variable semanal de sistema de modelación para incorporar la variabilidad semanal de emisión de cada zona especificada (Ontario Ministry of the Environment, 2009; EPA, 2018). La altura de 1 m se escogió en base a estudios realizados por la U.S. EPA en el desarrollo del modelo de dispersión CALINE, un modelo sencillo que permitía evaluar impactos en calidad del aire asociados a fuentes móviles, con una meteorología muy simplificada con respecto a las actuales características de AERMOD. La variabilidad semanal de las emisiones se obtiene de los perfiles temporales desarrollados como parte de la metodología MODEM, usando información local de conteos de vehículos en la ciudad de Valdivia.

2.2 Modelación de contaminantes atmosféricos vehiculares con AERMOD (2° Estadio)

Luego de procesar la información de entrada, se procedió a modelar las concentraciones del MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO emitido por fuentes vehiculares, a nivel horario durante el año 2019, en el receptor cartesiano ubicado en la EMCA Valdivia I.

2.2.1 Análisis de sensibilidad

Junto con la modelación los contaminantes mencionados anteriormente, se realizaron diversas pruebas de simulación utilizando distintos radios de inclusión de fuentes (arcos del inventario de emisión), con la intención de conocer la distancia a la cual la incorporación de fuentes, bajo distintas condiciones de información meteorológica, ya no tiene efectos en las concentraciones estimadas por AERMOD. Este procedimiento se denominó *análisis de sensibilidad de fuentes* y los radios utilizados se muestran a continuación (**Figura 5**).

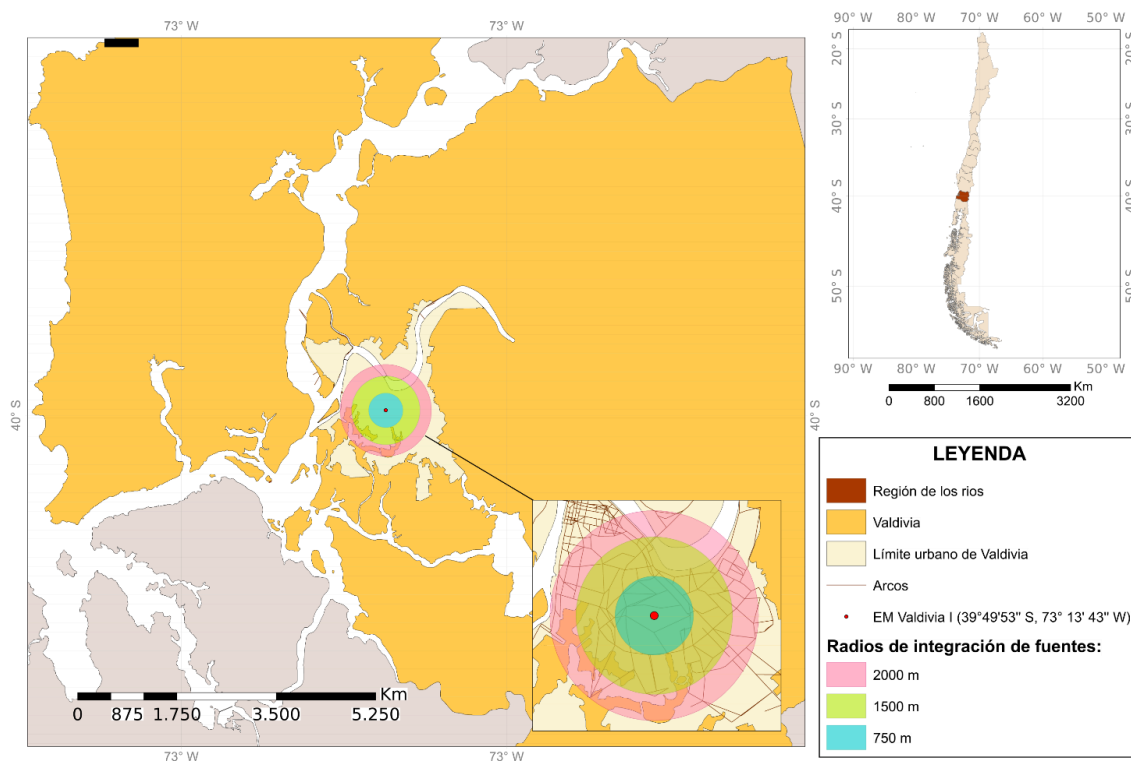


Figura 5. Cartografía de la ciudad de Valdivia con los radios de integración de fuentes del análisis de sensibilidad, el receptor utilizado en la modelación con AERMOD y los arcos definidos por la implementación de MODEM.

2.3 Levantamiento de datos contaminantes de referencia (3° Estadio)

La concentración de referencia de MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO emitido por fuentes vehiculares fue obtenida mediante la combinación de distintas metodologías de análisis y reparto de fuentes que se describen a continuación.

2.3.1 Determinación de material particulado emitido por el tráfico: análisis de contribución de fuentes de aerosoles

A partir de los datos de concentración de $MP_{2,5}$ y MP_{10} ; y las distintas variables meteorológicas registradas por la EMCA Valdivia I desde el año 2013 en adelante, un grupo de investigación del director del seminario realizó un análisis de conglomerados de *k*-medias (AC) utilizando la función *polarCluster* del paquete *openair* de R. Esto, con la finalidad de separar la contaminación muestreada por la EMCA en distintos grupos según características comunes (e.g. dirección de donde proviene, hora a la que se produce, entre otros) (Govender et al., 2020).

Para asignar la contaminación emitida por diversas fuentes a uno o más grupos resultantes del AC, se utilizaron los siguientes criterios empleados para determinar las concentraciones de referencia y resolver el número y tipo de conglomerados propuesto en Jorquera & Villalobos, 2020:

- Las fuentes emisoras de quema de leña residencial (wb) exhiben una relación de $MP_{2,5}/MP_{10}$ de 0,7 o mayor y son características de solamente presentar una línea principal de borde en los diagramas de dispersión que representa a ese tipo de contaminación mayoritaria. También, este tipo de contaminación es característico por presentar el mayor grado de estacionalidad marcada, en comparación a los demás conglomerados y además alcanza sus valores máximos en los meses fríos (junio, julio y agosto). Por último, este tipo de contaminación es característico por poseer picos de concentración en la medianoche durante los meses más fríos.
- Las fuentes asociadas al tráfico vehicular son características de exhibir en los diagramas de dispersión una nube de puntos delimitada principalmente por dos

líneas de borde. Una de ellas con una razón de $MP_{2,5}/MP_{10}$ cercano a 1:1 característica de las emisiones de *Escape* y otra inferior con una razón de $MP_{2,5}/MP_{10}$ muy pequeña cercana a 0, característica de emisiones del transporte *No-escape*. En general este tipo de contaminación posee mínimos de concentración durante los fines de semana, además de mostrar picos de concentración que coinciden con los horarios diurnos de mayor tráfico, es decir, de 6:00-09:00 am y 17:00-21:00 am. También este tipo de contaminación suele mantener una correlación negativa con respecto a la velocidad de viento.

- La contaminación producto de quema de leña residencial, tiende a aumentar con el aumento de la humedad relativa medida por las estaciones, mientras que para la contaminación emitida de forma fugitiva (i.e. material particulado *No-Escape* emitido por el transporte) tiende a disminuir.
- El método de análisis de conglomerados a diferencia de los análisis de modelos de reparto de fuentes (RM), permite también detectar fuentes regionales intermitentes de largo alcance, teniendo en cuenta que cuando las velocidades de viento aumentan su intensidad, las corrientes de viento generan que lleguen masas de aire cada vez más lejanas de carácter regional.
- La elección del número de conglomerados y de las fuentes involucradas en el proceso se realiza comparando los resultados del AC con datos obtenidos por algún modelo de reparto de fuentes (RM) de la zona e información bibliográfica de la contaminación de aerosoles en la zona estudiada. Para este caso en particular, dicho proceso se realizó utilizando los datos del RM desarrollado en para la ciudad de Valdivia en Jorquera et al., 2021 e insumos como el PDA de Valdivia (MMA, 2017a) junto a otros estudios revisados.

A continuación, se enlistan las principales características y hallazgos del Jorquera et al., 2021, junto a una breve descripción del modelo de reparto utilizado.

- El modelo utilizado para realizar el análisis de contribución de fuentes emisoras del $MP_{2,5}$ en Jorquera et al., 2021 corresponde al “*Chemical Mass Balance Receptor Model*” (CMB) desarrollado por la U.S. EPA versión 8.2. Este modelo de reparto de fuentes utiliza características químicas y/o físicas de gases y partículas muestreados en el lugar de medición del contaminante para identificar y cuantificar la contribución de las principales fuentes emisoras a la concentración ambiental del contaminante estudiado (Hanzel & Durham, 2005).
- En Jorquera et al., 2021 como marcadores moleculares específicos de fuentes, se consideró: 1. Carbono elemental (CE); 2. Hidrocarburos aromáticos Policíclicos (PAH), que dependiendo del compuesto pueden indicar la presencia o ausencia de emisiones de Diésel y combustión de carbón, por ejemplo, si se tiene una razón de en la concentración másica de Benzo(b)fluoranthene / Benzo(k)fluoranthene mayor a 0,5 corresponde a un indicio de emisiones de la combustión de Diésel, mientras que la presencia de Piceno es indicio de la presencia de emisiones provocadas por la combustión de carbón; 3. n-alcanos; 4. Hopanos, trazadores de la contaminación proveniente del tráfico vehicular y 5. Levoglucosano, trazador de la contaminación provocada por la quema de leña.
- Los resultados del estudio dilucidaron que dentro de las principales fuentes en la ciudad de Valdivia se encontraba, la quema de leña, como

fuerza principal de contaminación, el consumo de diésel por vehículos, la quema de combustibles vegetativos, aerosoles orgánicos secundarios, principalmente emitido de forma indirecta por la quema de leña, la combustión de carbón y el polvo de las calles.

Así, en base a la información y los criterios mencionados anteriormente, se asignó cada conglomerado (o conjunto de grupos) de datos de concentración a diversas fuentes de contaminación. A continuación, se especifica brevemente cada uno de ellos:

- **MP_{2,5wb} y MP_{10wb}**: Material particulado producto de la quema de leña.
- **(MP_{2,5tr} y MP_{10tr})**: Material particulado producto de fuentes móviles.
- **(MP_{2,5sec} y MP_{10sec})**: Material particulado secundario formado en la atmósfera, a partir de emisiones de óxidos de nitrógeno (NO_x, principalmente emitidos por el transporte), de compuestos orgánicos volátiles (COV), los cuales son emitidos por actividades naturales (vegetación) y antropogénicas, de óxidos de azufre (SO_x, que se espera sean muy bajos en la zona) y de amoníaco (NH₃); este último proviene principalmente de la crianza de animales.
- **(MP_{2,5soa} y MP_{10soa})**: Concentración de aerosoles orgánicos secundarios (SOA) producto de la oxidación de compuestos orgánicos semi-volátiles generados en procesos ineficientes de quema de leña. Este proceso es rápido y se inicia en el mismo cañón de descarga de emisiones de la combustión, donde ya se han oxidado rápidamente los compuestos orgánicos emitidos en dicha combustión incompleta; dichos compuestos continúan siendo procesados en la atmósfera a través de procesos de oxidación y de condensación a fase partícula (Nalin et al., 2016).

- **(MP_{2,5reg} y MP_{10reg}):** Concentración de material particulado proporcionado por fuentes regionales. Los aportes de estas fuentes son mayores por las tardes, cuando el viento alcanza sus mayores velocidades en la ciudad, es decir, se trata de masas de aire viento arriba de la ciudad, las que transportan emisiones de MP_{2,5} hacia la ciudad; por ejemplo, polvo fugitivo de actividades agrícolas o de caminos sin pavimentar.
- **(MP_{2,5ns} y MP_{10ns}):** corresponde al ruido asociado a eventos intermitentes en los datos de MP_{2,5} y MP₁₀ originales. Corresponde a múltiples fuentes locales y cercanas al monitor SINCA.

Paralelamente, se realizó un análisis cualitativo y cuantitativo de las concentraciones obtenidas de los conglomerados resueltos para el año 2019 para analizar la tendencia de estos resultados y su validez.

2.3.2 Determinación de contaminación *Exhaust* y *No-escape* de referencia: análisis de líneas de borde

La contaminación de referencia *Escape* y *No-escape* de los aerosoles estudiados se estimó mediante el análisis de líneas de borde. Este análisis, es un modelo de reparto de fuentes gráfico y cuantitativo, diseñado a partir del modelo UNMIX (Henry, 2003) para estimar el aporte distintas fuentes a un contaminante. El método aplicado consistió en cuantificar el aporte de las distintas formas en las que se emite la contaminación vehicular (*Escape* y *No-escape*). Para esto, se visualizaron las concentraciones históricas del MP₁₀ y MP_{2,5} (X e Y respectivamente) provenientes del tráfico vehicular (MP_{2,5tr} y MP_{10tr}) en un diagrama de dispersión; luego, se interpretó la composición de fuentes como líneas de borde límites, según la razón MP₁₀/MP_{2,5}.

En este contexto, cualquier punto del diagrama de dispersión histórico del material particulado asociado al tráfico puede ser descrito por la suma lineal de los dos únicos tipos de contribuciones a la fuente (*Escape* y *No-escape*), por lo que se obtuvieron dos líneas de borde caracterizadas por las siguientes ecuaciones generalizadas de la recta:

$$y_{max} = x_{max} \cdot \beta_{max} + C_{max} \text{ (Ec. 4)}$$

$$y_{min} = x_{min} \cdot \beta_{min} + C_{min} \text{ (Ec. 5)}$$

Debido a las diferencias composicionales del material particulado *Escape* y *No-escape* la línea de borde superior describe los escenarios en donde sólo se capta contaminación vehicular de material particulado *Escape* (proporción con gran contenido de $MP_{2,5}$), mientras que la línea de borde inferior describe la contaminación vehicular de aerosoles de forma *No-escape* (Proporción con gran contenido de MP_{10}). La pendiente de cada una de las ecuaciones de la recta representa la variación de la variable “y” ($MP_{2,5}$) con respecto a la variable “x” (MP_{10}), por lo que β se puede describir como la razón entre ambos contaminantes según la forma en la que son emitidos (Hopke, 2016; Hassan, 2020; Henry, 2003). Por lo que en la línea de borde superior se cumple que:

$$\frac{x_{max}}{y_{max}} = \frac{MP_{2,5} \text{ exhaust}}{MP_{10} \text{ exhaust}} = \beta_{max} \text{ (Ec. 6)}$$

$$MP_{2,5} \text{ exhaust} = \beta_{max} \cdot MP_{10} \text{ exhaust} \text{ (Ec. 7)}$$

Ídem, para la línea de borde inferior:

$$\frac{x_{min}}{y_{min}} = \frac{MP_{2,5} \text{ non-exhaust}}{MP_{10} \text{ non-exhaust}} = \beta_{min} \text{ (Ec. 8)}$$

$$MP_{2,5} \text{ non-exhaust} = \beta_{min} \cdot MP_{10} \text{ non-exhaust} \text{ (Ec. 9)}$$

Además, según el principio de conservación de masa, se deben cumplir las siguientes expresiones:

$$MP_{2,5 \text{ Tráfico}} = MP_{2,5 \text{ Escape}} + MP_{2,5 \text{ No-Escape}} \quad (\text{Ec. 10})$$

$$MP_{10 \text{ Tráfico}} = MP_{10 \text{ Escape}} + MP_{10 \text{ No-Escape}} \quad (\text{Ec. 11})$$

A partir de la combinación de las relaciones (7) y (9) con el balance de masa de la ecuación (10), se obtiene que:

$$MP_{2,5 \text{ Tráfico}} = \beta_{\max} \cdot MP_{10 \text{ Escape}} + \beta_{\min} \cdot MP_{10 \text{ No-Escape}} \quad (\text{Ec. 12})$$

Finalmente, de la conjugación de las ecuaciones (11) y (12) se obtienen las expresiones para la cuantificación de la contaminación *Escape* y *No-escape* mediante los datos disponibles. Estos valores, fueron utilizados como referencia para evaluar las concentraciones de aerosoles horarias estimadas por AERMOD.

$$MP_{10 \text{ No-Escape}} = \frac{\beta_{\max} \cdot MP_{10 \text{ Tráfico}} - MP_{2,5 \text{ Tráfico}}}{\beta_{\max} - \beta_{\min}} \quad (\text{Ec. 13})$$

$$MP_{10 \text{ Escape}} = \frac{MP_{2,5 \text{ Tráfico}} - \beta_{\min} \cdot MP_{10 \text{ Tráfico}}}{\beta_{\max} - \beta_{\min}} \quad (\text{Ec. 14})$$

$$MP_{2,5 \text{ No-Escape}} = \beta_{\min} \cdot MP_{10 \text{ non-Exhaust}} \quad (\text{Ec. 15})$$

$$MP_{2,5 \text{ Escape}} = \beta_{\min} \cdot MP_{10 \text{ Exhaust}} \quad (\text{Ec. 16})$$

2.3.3 Estimación del CO emitido por el tráfico: Regresión lineal multivariable

Para estimar la fracción de CO emitido por el tráfico, se utilizaron los valores de $MP_{2,5}$ cuantificado de las distintas fuentes de contaminación, resultantes de AC, como variables independientes que explican la concentración ambiental total del CO mediante una regresión lineal múltiple (MLR). El modelo de regresión utilizado se construyó a

partir de la metodología paso a paso (*stepwise*), probando los métodos de selección de variables (*Forward*) y de eliminación de variables (*Backward*), mediante la función *StepAIC* del módulo *MASS* para lenguaje R, que basa el proceso de selección de variables en el criterio de información Akaike (*AIC*) (Yamashita et al., 2007). La ecuación general del MLR utilizado se muestra a continuación:

$$[CO]_{total\ ppm} = \beta_1 \cdot [PM\ 2,5]_{F_1} + \dots + \beta_n \cdot [PM\ 2,5]_{F_n} + \varepsilon \quad (\text{Ec.17})$$

Donde “*F*, ..., *F_n*” corresponde a cada fuente (o conglomerado) que emite el contaminante, caracterizada por AC.

La validación del modelo de regresión fue a través de dos formas:

- Se utilizó un proceso de validación simple, excluyendo un mes aleatorio de datos del proceso de modelación y luego se compararon los valores de dicho mes excluido, con los valores predichos para ese periodo por el modelo a través de una serie temporal.
- Se realizó un análisis de los residuos del modelo predictivo, realizando una prueba de Durbin Watson, y estudiando la magnitud del coeficiente de bondad del ajuste (R^2) para el conjunto de datos modelados (Jeng & Martin, 1985).

Luego de la validar el modelo, se utilizaron sus estimadores de MLR junto a los valores $MP_{2,5}$ brindados por AC, para calcular el CO producido por diversas fuentes de emisión mediante las ecuaciones 13-16.

2.4 Evaluación estadística de los resultados modelados (4° Estadio)

Para la validación y el análisis de los dos modelos teóricos aplicados en el presente estudio (WRF y AERMOD) se utilizaron métricas visuales y estadísticos de

evaluación. Para la comparación cualitativa de los resultados se usaron series temporales, diagramas de Taylor, rosas de viento y gráficos de barras. Estos, fueron generados con las librerías *ggplot2*, *lubridate* y *openair* del lenguaje R (Carslaw et al., 2012; Wickham et al., 2011).

La evaluación cuantitativa de los datos modelados (M), se realizó por medio de los estadísticos brindados por la función *Modstats* de la librería *openair*. A continuación, se describe cada parámetro estadístico, donde “M” corresponde al conjunto de datos modelados y “O” a la información de referencia.

- **Coeficiente de correlación de Pearson (r)**: Coeficiente, que indica la dependencia lineal entre dos variables continuas.

$$r = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^n \left(\frac{M_i - \bar{M}}{\sigma_M} \right) \left(\frac{O_i - \bar{O}}{\sigma_O} \right) \text{ (Ec. 18)}$$

Si $r \approx 1$, existe una relación lineal perfecta positiva entre los valores modelados con respecto a los observados. Si $r \approx -1$, existe una relación lineal perfecta negativa entre los valores modelados y observados. Si $r \approx 0$, la relación lineal entre los datos modelados y observados es nula.

- **Sesgo medio y sesgo medio normalizado (MB y NMB)**: Indicador de estadístico que evalúa la potencial sobre-predicción y sub-predicción, mediante el sesgo del modelo con respecto a los datos de referencia.

$$MB = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n M_i - O_i \text{ (Ec. 19)}$$

$$NMB = \frac{\sum_{i=1}^n M_i - O_i}{\sum_{i=1}^n O_i} \text{ (Ec. 20)}$$

Un valor de MB y NMB sobre 0, indica la sobre-predicción y un valor menor a cero indica la sub-predicción del modelo. En el caso de MB, su valor mantiene

las unidades de la variable evaluada, por lo que con este parámetro es posible saber en qué magnitud se sobre-predice o se sub-predice al conjunto de datos de referencia. Su versión normalizada (NMB) se utiliza para comparar variables que se representan en distintas escalas y/o unidades; por ejemplo, saber si el modelo sobre-predice o sub-predice más la velocidad o la dirección del viento (distintas unidades).

- **Error medio bruto y error medio bruto normalizado (MGE y NMGE):**

Indicador estadístico que evalúa el sesgo de los datos al igual que MB, pero penaliza la sobre-predicción y la sub-predicción de igual manera mediante el valor absoluto del sesgo, evitando los efectos contrarios que se pueden generar en MB. Por ejemplo, es posible que el efecto de un subconjunto de datos modelados que sobre-predigan a los datos de referencia sea anulado por otro subconjunto de datos que lo sub-predigan, resultando en un MB cercano a cero no representativo del conjunto de datos, pero en un MGE distante de cero que refleja el mal desempeño del modelo. Se calcula de la siguiente forma:

$$MB = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |M_i - O_i| \text{ (Ec. 21)}$$

$$NMB = \frac{\sum_{i=1}^n |M_i - O_i|}{\sum_{i=1}^n O_i} \text{ (Ec. 22)}$$

Al igual como con MB, su versión normalizada permite comparar valores obtenidos de conjuntos de datos en distintas unidades y/o escalas.

Mientras MGE sea más cercano a cero, mejor es el modelo desde el punto de vista del sesgo de los datos modelados.

- **Error medio cuadrático (RMSE)**: Indicador estadístico que evalúa la cercanía numérica de los valores modelados con sus respectivos valores de referencia. Es característico por incorporar el sesgo y la varianza para comparar los conjuntos de datos.

$$RMSE = \left(\frac{\sum_{i=1}^N (M_i - O_i)^2}{n} \right)^{1/2} \text{ (Ec. 23)}$$

Mientras el valor de RMSE sea más cercano a cero, mejor es el desempeño del modelo.

Adicionalmente, también se analizaron los valores del RMSE centrado (RMSEC), que se define de la siguiente forma matemáticamente:

$$RMSEC = \left(\frac{\sum_{i=1}^N [(M_i - \bar{M}) - (O_i - \bar{O})]^2}{n} \right)^{1/2} \text{ (Ec. 24)}$$

Que analiza el sesgo y la varianza de las desviaciones de los valores modelados y observados con respecto a su media, lo que funciona como medida de evaluación de la variación de los sesgos de los valores modelados. Este parámetro estadístico, es incluido de manera implícita en el diagrama de Taylor, una de las métricas cualitativas utilizadas para observar y comparar el desempeño de uno o más modelos predictivos (Taylor, 2011).

- **Factor de dos (Fac2)**: Indicador estadístico que evalúa la razón de los datos modelados con sus respectivos valores de referencia dentro de un factor de dos.

$$0,5 \geq \frac{M_i}{O_i} \geq 2 \text{ (Ec. 25)}$$

Este estadístico, se obtiene relacionando el número de valores modelados que cumplen con la ecuación (25) con el número total de valores modelados. Como se muestra a continuación:

$$Fac2 = \frac{n_{mod\ fact\ 2}}{n_{mod\ totales}} \text{ (Ec. 26)}$$

El factor de dos (Fac2) puede tomar valores desde cero a uno, mostrando mejor desempeño del modelo cuando se acerca más a uno.

- **Coefficiente de eficiencia (COE)**: Indicador estadístico, que evalúa la eficiencia de predicción del modelo a través de la relación del sesgo medio del conjunto de los datos modelados con el sesgo medio de los valores de referencia de la siguiente forma (Legates & McCabe, 2012; Legates & McCabe Jr, 1999).

$$COE = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n |M_i - O_i|}{\sum_{i=1}^n |O_i - \bar{O}|} \text{ (Ec. 27)}$$

Un valor de COE cercano y menor a cero, indica que el valor promedio de los datos observados tiene ventaja predictiva con respecto al modelo utilizado. Un valor de COE mayor a 1, indica lo contrario, el modelo tiene ventaja predictiva con respecto a la media aritmética de los datos de referencia.

3. RESULTADOS

3.1 Análisis de incertidumbre de la información meteorológica: Evaluación de WRF

Para evaluar cualitativamente la información de la dirección del viento brindada por el modelo WRF se realizó una rosa de sesgos de vientos, que gráfica las diferencias numéricas de los valores de velocidad y dirección de viento modelados con la información empírica de la EMCA Valdivia I mediante un diagrama polar. Este análisis, es una variación de la función *PollutionRose* del paquete *openair* de R.

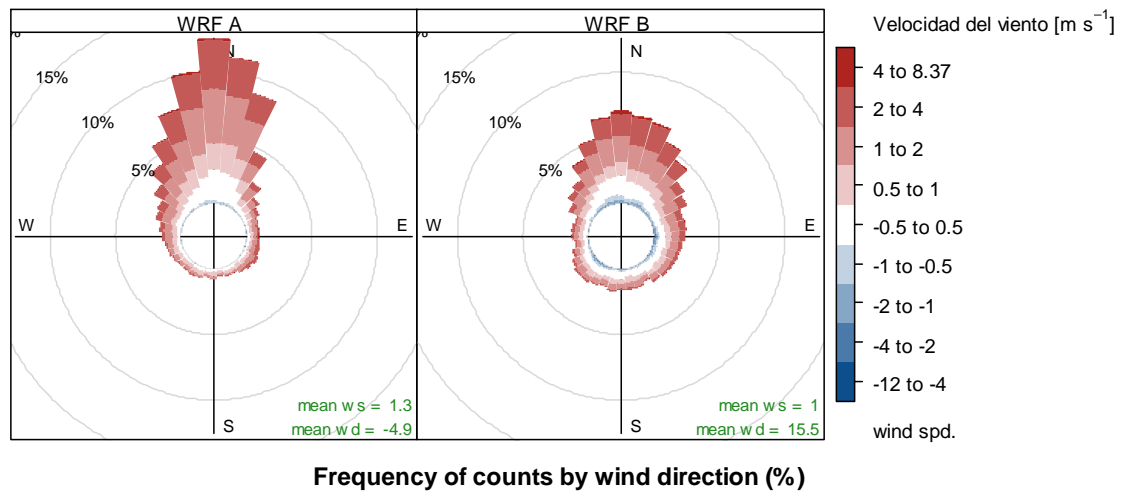
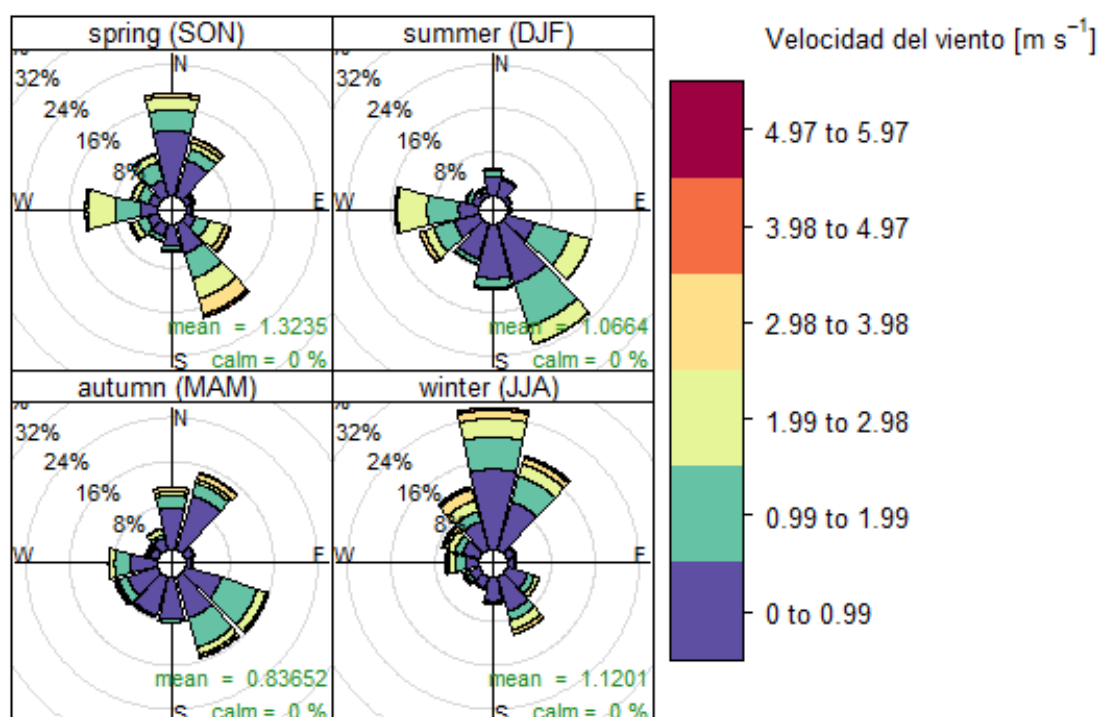


Figura 6. Rosa de sesgos de vientos del modelo WRF vs SINCA (Valdivia I).

La distribución de las variables asociadas a los campos de viento de WRF en relación con los datos muestreados por EMCA Valdivia I muestra que, en ambas configuraciones, el sesgo de la dirección del viento proviene mayoritariamente desde el norte de la estación de monitoreo. Y además, debido a las magnitudes de los sesgos, la figura muestra que ambos modelos presentan un buen desempeño para simular la dirección del viento observada, sin embargo, la configuración B, exhibe un mejor desempeño en términos de esta variable que la configuración A, ya que la magnitud de este sesgo en la dirección es menor.

Por otro lado, los promedios de los sesgos de velocidad de viento sugieren que en ambas configuraciones el modelo sobre-predice los valores observados en 1,3 y 1 m/s para las configuraciones A y B, respectivamente.

A continuación, se muestra una rosa de vientos de los datos meteorológicos muestreados por la estación Valdivia I, con la intención de aumentar el alcance del análisis de la rosa de sesgos presentada en la **Figura 6**.



Frequency of counts by wind direction (%)

Figura 7. Rosa de vientos de los datos de SINCA (Valdivia I) durante el 2019.

La **Figura 7**, muestra una predominancia de los vientos Noreste y Norte, esto debido a que la frecuencia promedio de los vientos en dichas direcciones en todas las estaciones del año corresponden a la mayor parte de los datos de dirección de viento. En este sentido, es posible que el sesgo de la configuración A presentado en la **Figura 6 6**, tenga grandes implicancias en la concentración de los contaminados modelados que provengan del norte y el noreste de la estación de monitorio en comparación. Por lo tanto, este análisis refuerza la idea de que se debe utilizar la configuración B del modelo meteorológico para disminuir la incertidumbre asociada a la dirección del viento en AERMOD, ya que se tiene que gran parte de los escenarios de dispersión de contaminantes se darán desde el Norte y Noreste hacia el Sur y Suroeste, respectivamente.

Con respecto a las velocidades de viento, el análisis indica que prevalecen las velocidades bajas (menores a 2 m/s), lo que sugiere que existe una gran diferencia entre las velocidades simuladas por ambas configuraciones del modelo a nivel superficial y lo que también podría favorecer la prevalencia de contaminación proveniente del tráfico vehicular, ya que se disminuyen las condiciones de ventilación. Por otro lado, también se observa que las condiciones de viento oeste y Sur Oeste prevalecen en los escenarios cálidos y semi cálidos, disminuyendo en condiciones frías (invierno). Los escenarios con mayores velocidades de viento se alcanzan entre los meses de invierno y primavera según los datos de la estación.

Para evaluar cualitativamente el comportamiento temporal del modelo en las tres variables (“no polares”) meteorológicas medidas por la EMCA Valdivia I durante el 2019 se realizaron series temporales mensuales con el paquete *ggplot2* de R, las cuales se muestran a continuación:

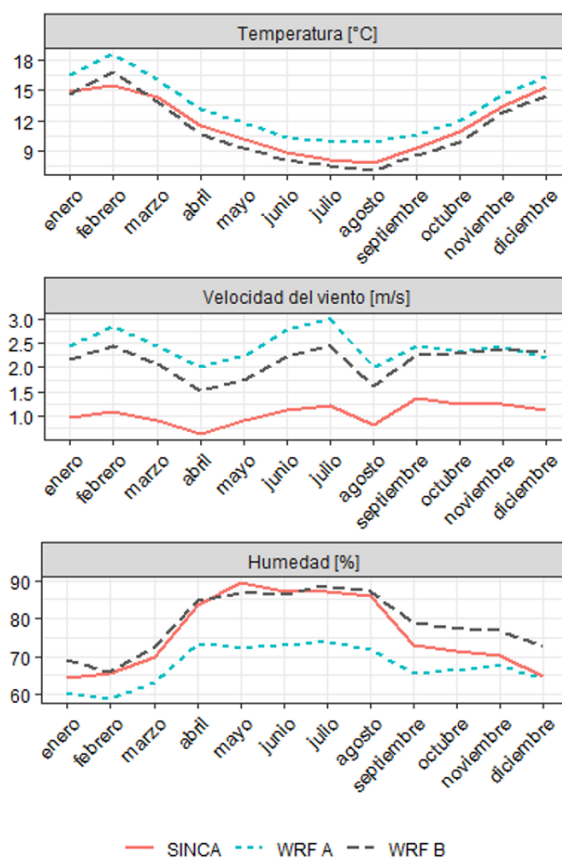


Figura 8. Series temporales de las variables meteorológicas modeladas promediadas mensualmente por WRF y valores monitoreados por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el año 2019.

La **Figura 8** muestra que la humedad relativa modelada por la configuración B del modelo reproduce mejor los valores monitoreados por la EMCA Valdivia I. En el caso de la temperatura ambiental, ambas configuraciones logran un grado de estimación similar con respecto a los datos empíricos, una de ellas sobre prediciéndolos (WRF-A) y otra sub prediciéndolos (WRF B).

Además, en ambos modelos (WRF-A y WRF-B) la serie temporal de la velocidad del viento muestra que se sobre-predice la información de monitoreo, siendo mayor la

sobre-predicción en WRF-A que en WRF-B (lo que es consistente con los valores de los sesgos promedio ya detallados). También, es posible visualizar que ambos modelos son capaces de atrapar la mayor parte de la variabilidad de los valores de velocidad del viento observados, es decir, que la tendencia de disminución y aumento de los datos empíricos es reproducida por ambas configuraciones (WRF-A y WRF-B).

Para analizar y comparar pseudo-cuantitativamente la capacidad de WRF para simular los datos observados se utilizaron diagramas de Taylor haciendo uso de la función *taylorDiagram* del paquete *openair*.

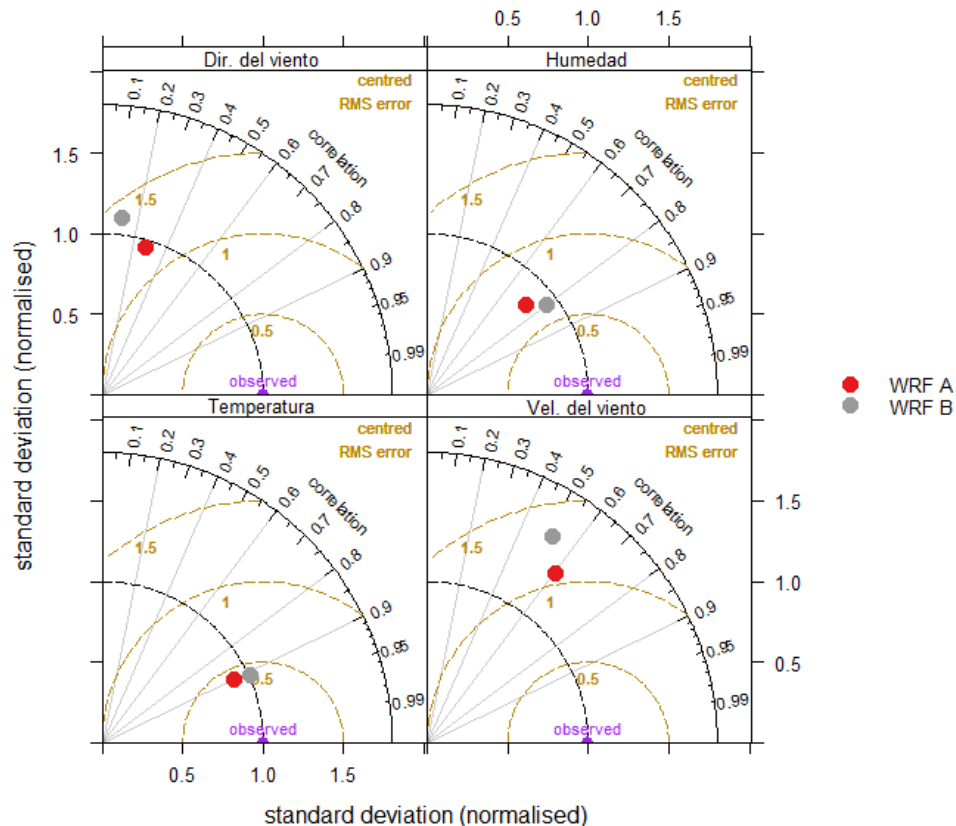


Figura 9. Diagrama de Taylor de las variables meteorológicas modeladas por WRF y la información observada brindada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA.

De la **Figura 9** se desprende que, en ambas configuraciones del modelo, tanto la humedad como la temperatura presentan un grado de correlación lineal alto y un RSMEC similar con respecto a los datos observados. Esto indica que, en ambas configuraciones, el modelo es capaz de explicar de forma similar la tendencia y variabilidad del conjunto de datos observados. En el caso de la desviación estándar normalizada (σ_N), el análisis muestra que la configuración B tiene un mejor desempeño para emular la variabilidad de los valores de referencia, ya que posee una σ_N similar. En resumen, el análisis del diagrama de Taylor para estas dos variables meteorológicas

indica que la configuración B muestra un mejor desempeño (más cerca del arco de línea segmentada en dicho diagrama).

En el caso de la velocidad del viento el diagrama muestra que WRF-A tiene un mayor potencial predictivo que WRF-B, desde el punto de vista de r -Pearson, RSMEC, y σ_N .

La diferencia entre los resultados de la **Figura 8** y los del diagrama de Taylor (**Figura 9**) se debe a que estos últimos trabajan con datos horarios, mientras que las gráficas en la **Figura 8** son promedios mensuales.

Para complementar finalmente el análisis, a continuación, se presenta una tabla resumen de los parámetros estadísticos brindados por la función *Modstats* del paquete *openair* utilizados para evaluar las dos configuraciones del modelo meteorológico, donde se hizo énfasis en aquellos valores importantes que contrastan o apoyan ideas aún no mostradas en el análisis de incertidumbre meteorológico.

Tabla 2. Resumen de valores de los criterios estadísticos utilizados para evaluar cada variable meteorológica de las configuraciones de WRF.

Criterio	Temperatura		Humedad		Vel. del viento		Dir. del viento	
	WRF A	WRF B	WRF A	WRF B	WRF A	WRF B	WRF A	WRF B
FAC2	0,96	0,97	0,99	1,00	0,38	0,34	0,72	0,55
MB	1,30	-0,89	-8,41	3,03	1,34	1,04	24,24	6,81
MGE	1,74	1,70	11,69	9,03	1,40	1,31	77,82	108,15
RMS	2,35	2,13	15,03	11,63	1,71	1,66	127,91	151,08
COE	0,51	0,52	0,23	0,41	-0,67	-0,56	0,13	-0,20

* Parámetros que representan una desviación a los análisis de la variable realizados anteriormente y que son importante discutir.

Los valores de *FAC2* mostrados en la **Tabla 2** refuerzan el análisis realizado anteriormente para la temperatura, humedad y dirección del viento; sin embargo, el valor del *Fac2* para las velocidades de viento, indican que el modelo A tiene un mejor

desempeño que el modelo B, lo que sugiere que el modelo A genera menos valores extremos en relación con los valores de referencia. Además de esto, el RMS indica que, si bien el sesgo y la varianza de los valores es simulada con más exactitud por el modelo A según el diagrama de la **Figura 9**, la magnitud de los valores del modelo B reproducen mejor los datos meteorológicos de referencia.

Por otro lado, el COE para la velocidad del viento indica que el modelo B es más eficiente que el modelo A para estimar los valores observados, por lo que finalmente el análisis evidencia que el modelo B predice mejor la velocidad de viento observada, pero que genera más valores extremos.

3.1.1 Análisis cualitativo histórico de la velocidad de viento de la EMCA Valdivia I.

Para analizar la tendencia de la velocidad de viento medida por la EMCA Valdivia I, que es la variable donde WRF presenta mayor sesgo, se realizó un análisis cualitativo para investigar las posibles causas de la sobre-predicción del modelo para este parámetro. Para ello se utilizó la función *smothTrend* de openair con la opción *deseason* y además se integró en el análisis los datos meteorológicos de la estación Las encinas de Temuco Chile de la red SINCA (EMCA Las Encinas), con el objetivo de utilizar los datos de la estación como una referencia para estudiar la evolución de las variables meteorológicas medidas de la estación Valdivia I y que permitan validar y/o explicar las similitudes y diferencias entre WRF y EM Valdivia I.

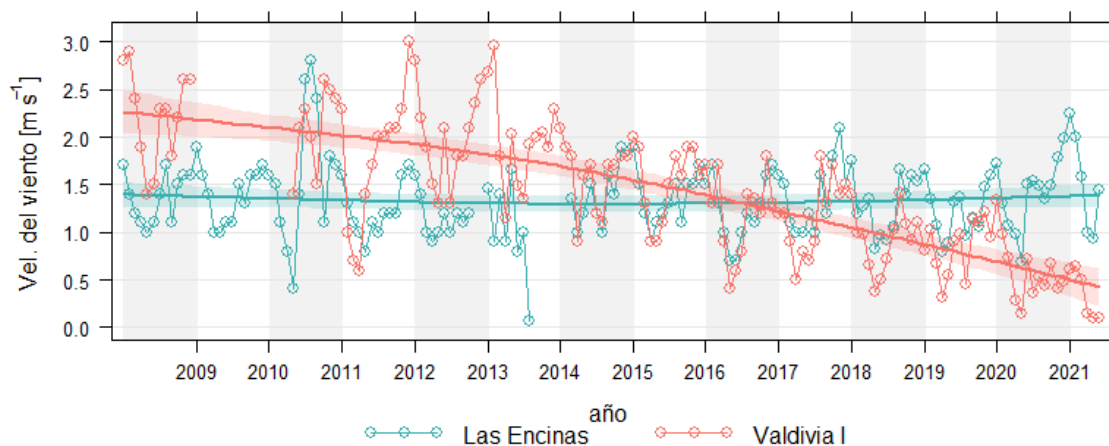


Figura 10. Serie temporal histórica de la velocidad de viento muestreada por la EMCA Valdivia I y la EMCA Las Encinas (Temuco).

La **Figura 10** muestra que existe una disminución de la velocidad de viento medida en la EMCA Valdivia I que no se visualiza en ninguna de las otras variables monitoreadas por la misma estación (Ver Anexos, Figura A8-A10) y tampoco comparando la misma variable en la EMCA Las Encinas (Temuco), en donde la variación de este parámetro meteorológico muestra una tendencia promedio que no varía sustancialmente en el tiempo. Este comportamiento no es típico en este parámetro meteorológico, debido a que en la escala utilizada la velocidad y dirección del viento sólo deberían sufrir variaciones estacionales (Seinfeld & Pandis, 2006), por lo que esta tendencia podría estar asociadas a factores externos, como, por ejemplo, el crecimiento de la altura de los árboles (y edificaciones) cercanos a la estación de monitoreo, que podría disminuir la velocidad de viento muestreada, generando problemas de representatividad de la EMCA Valdivia I con respecto a su sitio de emplazamiento. Tampoco se aprecia un cambio discreto en la magnitud de la velocidad del viento

medido en la EMCA Valdivia I, lo que correspondería a un cambio (o deterioro) del anemómetro allí instalado, lo cual no se evidencia en la figura anterior.

En síntesis, con respecto al análisis de incertidumbre, la configuración B mantiene una ligera ventaja predictiva en relación con la configuración A, ya que, si bien WRF-A muestra un desempeño de predicción ligeramente mejor para la velocidad del viento en algunos indicadores, las demás variables son simuladas con mayor exactitud por el modelo B. Este hecho, se utilizó como herramienta para decidir utilizar la configuración B como base de datos meteorológicos de entrada para el modelo AERMOD, por lo que para generar la meteorología híbrida a partir de los archivos *onsite* y *pfl* (***meteorología híbrida y meteorología híbrida onsite***, respectivamente) se utilizó la información meteorológica en altura de este modelo. Y también, como fuente de datos superficiales y de altura para la meteorología 100% modelada (***meteorología modelada***). Además, el análisis cualitativo temporal de la velocidad de viento sugiere que se debe cuestionar la representatividad de los datos del viento muestreados por la EMCA Valdivia I.

3.2 Análisis exploratorio de información de emisiones

Como se mencionó en la sección 2.2 del presente estudio, dentro de las emisiones atmosféricas vehiculares que se integraron se encuentran emisiones de: monóxido de carbono (CO), material particulado fino *Escape* (MP_{2,5}) y *No-escape* (PLMP_{2,5}), y material particulado total respirable *Escape* (MP₁₀) y *No-escape* (PLMP₁₀). La emisión de cada arco integrado a AERMOD fue distinguido según la zona de la red vial donde se ubicaba. A continuación, se muestra un diagrama de barras que resume la emisión

total anual, producto de la suma lineal de la emisión de cada arco, por zona de Valdivia y por contaminante.

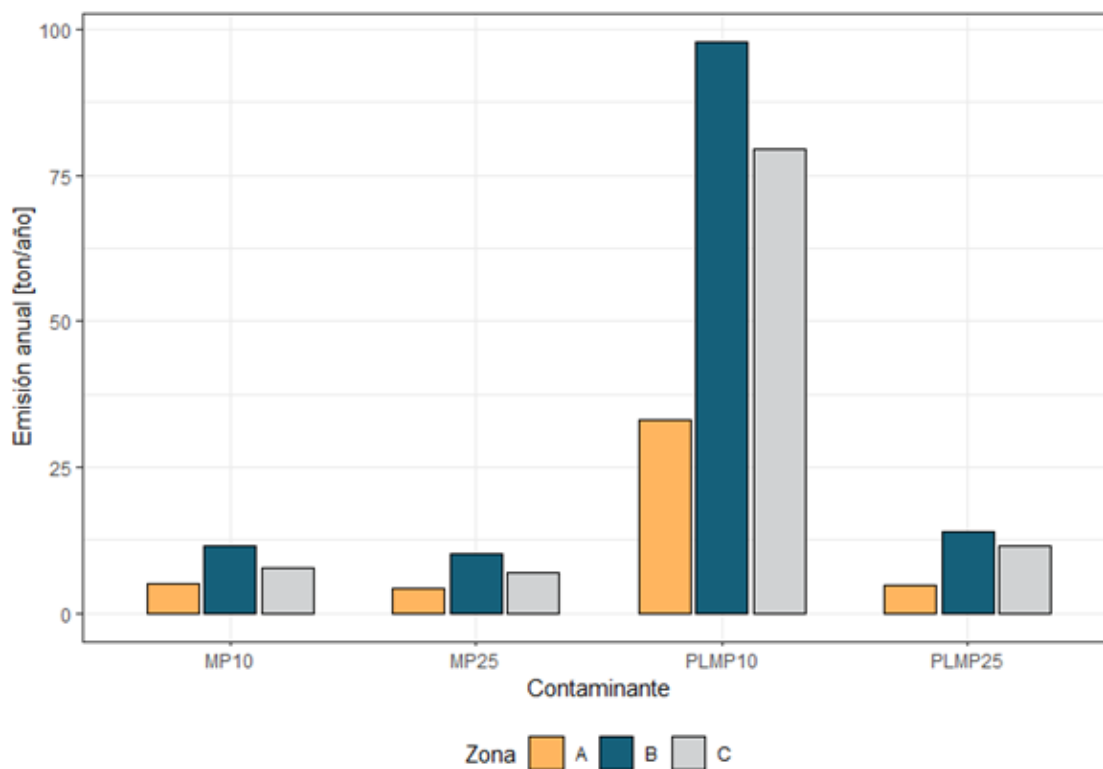


Figura 11. Gráfico de barras de la emisión anual de aerosoles contaminantes en las tres zonas de la red vial de Valdivia según contaminante. PLMP: Material Particulado *No-escape*. MP: Material particulado *Escape*.

La **Figura 11** muestra que la tendencia de emisión de los aerosoles se repite en cada zona analizada; siendo la zona B, aquella donde se emite mayor contaminación vehicular. La ubicación geográfica de la zona B en Valdivia (**Figura 3**) corresponde a la zona donde se encuentra la mayoría de las calles principales de la ciudad, y por lo tanto

los resultados de la **Figura 11** son consistentes con esto, ya que es la zona donde hay mayor flujo de vehículos que aportan contaminación.

Por otro lado, el diagrama de barras también muestra que las emisiones totales de los aerosoles *Escape* son similares entre sí, siendo ligeramente mayor la emisión de las partículas de MP_{10} con respecto a las finas ($MP_{2,5}$) (18,8%, 16%, 13% para las zonas A, B y C, respectivamente), pero logrando una relación cercana a uno. No obstante, en el caso de la contaminación *No-escape* (PLMP), la estimación del inventario muestra que la mayor parte de emisión vehicular de este tipo se emite en forma de material particulado grueso (MP_{10}), siendo las emisiones de $PLMP_{10}$ aproximadamente seis veces mayor que las emisiones $PLMP_{2,5}$ (5,96 veces mayor en todas las zonas). Además, la **Figura 11** muestra que las emisiones de este tipo son mucho mayores a las demás, por lo que probablemente los resultados del proceso de modelación tengan una tendencia similar.

Para aumentar el alcance del análisis, a continuación, se muestra tablas comparativas de los valores emisiones de *Escape* de material particulado total respirable y fino del inventario de emisiones elaborado con MODEM (utilizado) frente a los valores de emisiones por fuentes móviles en ruta de material particulado total respirable y fino según el análisis general de impacto económico y social del PDA de Valdivia (AGIES) (MMA,2015b) y el Informe Inventario de Emisiones (IE) para la comuna de Valdivia contenido en el expediente del PDA de Valdivia (MMA, 2015a).

Tabla 3. Emisiones *Escape* anuales clasificadas según referencia, año base de estimación y tipo de contaminante.

Tipo de emisión	Referencia	Año Base	MP _{2,5} [ton/año]	MP _{2,5} [ton/año]
Escape	Presente Estudio	2010	22	24
Escape	AGIES (MMA,2015b)	2013	15	16
Escape	IE PDA Valdivia (MMA, 2015a)	2013	15	18

Tabla 4. Emisiones *No-Escape* anuales clasificadas según referencia, año base de estimación y tipo de contaminante.

Tipo de emisión	Referencia	Año Base	MP _{2,5} [ton/año]	MP ₁₀ [ton/año]
No-Escape	Presente Estudio	2010	30	210
No-Escape	AGIES (MMA,2015b)	2013	-	-
No-Escape	IE PDA Valdivia (MMA, 2015a)	2013	-	-

Según los datos de las **Tabla 3** es posible apreciar que las emisiones de *Escape* utilizadas en el presente estudio son levemente superiores a las propuestas por los informes que analizan la contribución de emisiones en el PDA de Valdivia. Sin embargo, esto podría deberse principalmente a que la metodología de cálculo que se utiliza en estos inventarios no corresponde a MODEM.

Para el caso de la **Tabla 4**, sólo se muestran los datos de material particulado modelados por MODEM utilizados en el presente estudio ya que en ninguno de los dos informes revisados del PDA de Valdivia se estima esta contribución del tráfico a las emisiones de contaminantes (MMA, 2017a)

El siguiente gráfico de barras muestra la estimación de emisiones totales del monóxido de carbono (CO) por cada zona (**Figura 12**).

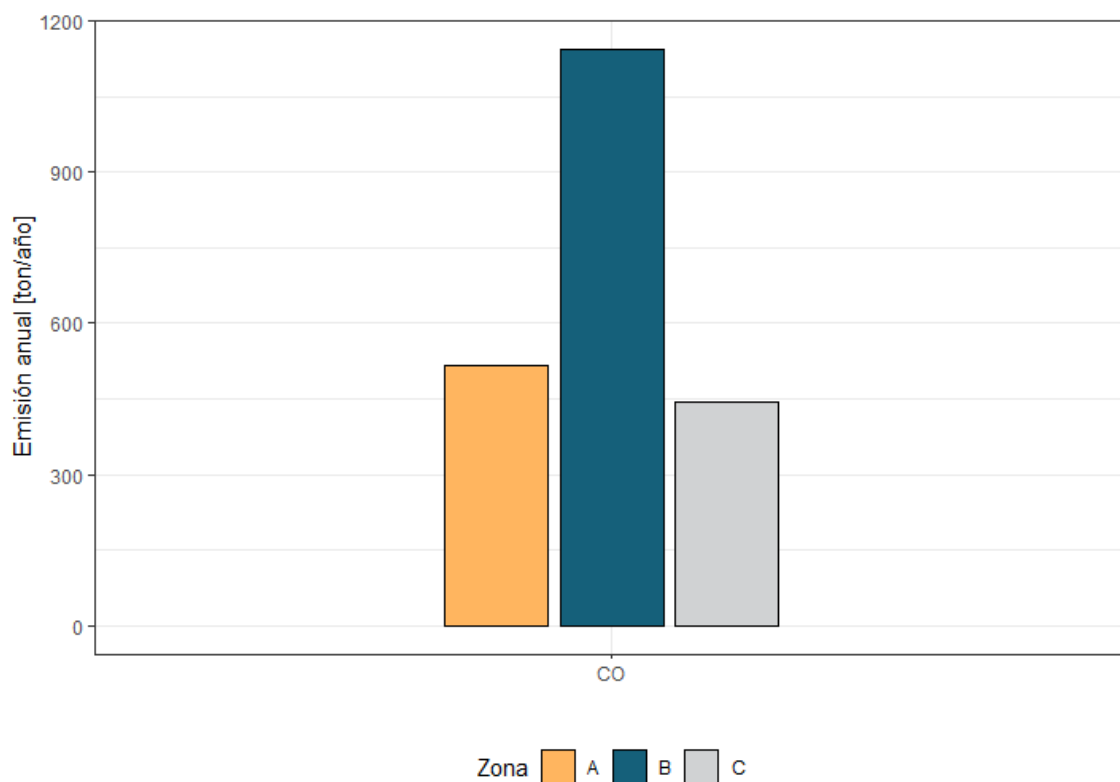


Figura 12. Gráfico de barras de la emisión anual del CO vehicular en las tres zonas de la red vial de Valdivia definidas en MODEM.

Al igual que en el diagrama de barras de emisión vehicular de aerosoles (**Figura 11**), la **Figura 12.** muestra una tendencia similar de emisión por zona. La zona B es el área donde se emite mayor cantidad de contaminante anualmente, seguido por la zona C y la zona A.

Además, la siguiente tabla muestra de forma comparativa las diferencias entre los distintos inventarios de emisión que consideran emisiones vehiculares en la comuna de Valdivia.

Tabla 5. Emisiones CO anuales clasificadas según referencia y año base de estimación.

Contaminante	Año Base	CO [ton/año]
Presente Estudio	2010	2.106
AGIES PDA Valdivia	2013	704
IE PDA Valdivia	2013	2.537

La **Tabla 5** que la información de MODEM se encuentra dentro del rango de emisiones del informe Inventario de emisiones del PDA de Valdivia, el cual se especifica que no utilizó MODEM para realizar las estimaciones (MMA, 2015a), sin embargo, mantiene grandes diferencias con respecto a las emisiones del AGIES del PDA de Valdivia (MMA,2015b). Estas diferencias probablemente se deban a la metodología de cálculo y al factor de ineficiencia utilizado en el cálculo de la emisión por vehículos (ya que la emisión de CO está directamente relacionada a la ineficiencia en la combustión). En ninguno de los dos insumos presentados en el expediente del PDA de Valdivia se especifica la metodología utilizada para realizar las estimaciones, sólo se menciona en MMA, 2015a que la metodología utilizada no fue MODEM, debido a que no se contaba con la información requerida para ejecutar el modelo en la ciudad de Valdivia en ese entonces por lo que no se puede realizar un análisis con mayor alcance para responder a esta tendencia.

Junto con la información de emisiones vehiculares de cada arco de la red vial, el proceso de transformación y procesamiento de datos de MODEM levantó una base de datos que contuvo la información del perfil temporal de emisión semanal-horario para cada una de las zonas definidas. A continuación, se muestran las series temporales que resumen el comportamiento de los factores de emisión variables incorporados en el sistema de modelación.

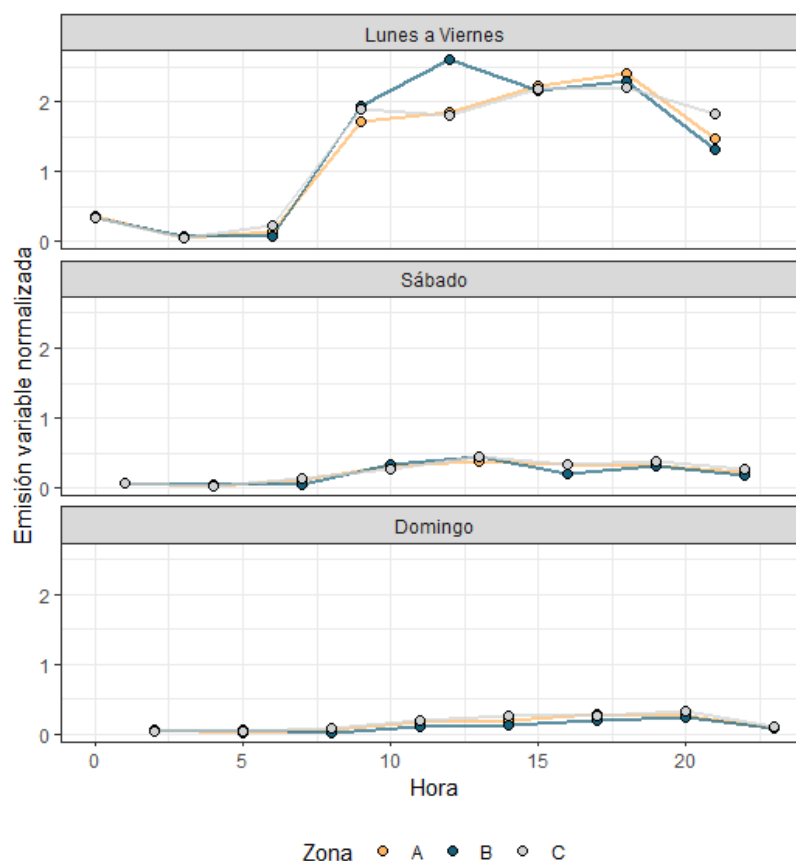


Figura 13. Perfil de factores de emisión variables normalizados en distintas etapas de la semana diferenciados por zonas. El valor 1 del eje de las ordenadas (eje y) corresponde al caso de la hora punta matinal en día laboral.

La **Figura 13** muestra que la emisión variable de cada uno de los arcos de emisión incorporados en AERMOD no depende de la zona de emisión, ya que los perfiles de actividad del parque vehicular son similares entre sí para cada una de las zonas en las distintas etapas de la semana. Además, la emisión variable los fines de semana disminuye sustancialmente con respecto a los valores que se alcanzan de lunes a viernes, alcanzando una reducción de emisión de aproximadamente el 90% de las emisiones, lo que debería reflejarse en los resultados del modelo.

3.3 Análisis de sensibilidad de integración de fuentes

A continuación, se muestra la serie temporal de los resultados de AERMOD en los diversos radios de integración de fuentes para el material particulado fino *Escape* ($MP_{2,5}$) utilizando distintas entradas de información meteorológica; la tendencia fue la misma para el resto de los contaminantes modelados (Ver Anexos, Figura A17-A18).

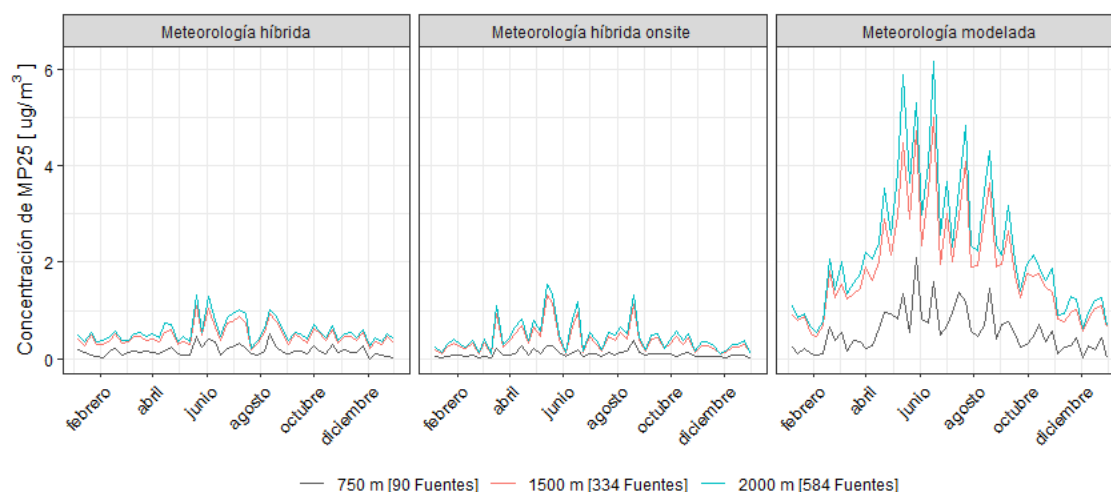


Figura 14. Series temporales de las concentraciones obtenidas en AERMOD de MP_{25} *Escape* utilizando diversas entradas de información meteorológica y distintos radios de integración de fuentes.

A partir del resultado del análisis de las series temporales de la **Figura 14.**, se desprende que el radio óptimo de integración de fuentes es de 2 Km. Esto, debido a la pequeña diferencia entre los perfiles de concentración a pesar del aumento de las fuentes emisoras incluidas, con una razón entre las concentraciones obtenidas de $MP_{2,5}$ en los radios de 1,5 Km y 2 Km promedio de $1,2 \pm 0,1$ para las tres configuraciones. Dicho esto, los resultados que se evaluaron fueron las concentraciones modeladas de los contaminantes utilizando un radio de integración de fuentes de 2 Km.

Analizando los resultados de concentración modelados por AERMOD con el radio óptimo de integración, se puede apreciar que las configuraciones del modelo que poseen entradas de información meteorológica híbrida (*Híbrida e Híbrida onsite*) muestran una concentración menor que los resultados con meteorología 100% modelada. Esta tendencia se repite también para el MP_{10} *Escape* y el CO (Ver Anexos, Figuras A17-A18).

3.4 Levantamiento de datos de referencia

A partir de los resultados obtenidos del análisis de conglomerados realizado por el grupo de investigación del profesor supervisor, se obtuvieron las concentraciones de $MP_{2,5}$ y MP_{10} emitidos por seis fuentes diferentes, basándose en los criterios descritos anteriormente en la sección 2.3.1.

Las concentraciones de los conglomerados resueltos y su contribución promedio al total del MP_{10} y $MP_{2,5}$ se presentan en las siguientes tablas.

Tabla 6. Valores promedio de concentración y contribución al $MP_{2,5}$ de los distintos conglomerados resueltos para el año 2019.

Conglomerado	Concentración promedio anual [ug/m3]	Contribución promedio anual al $MP_{2,5}$ ambiental [%]
$MP_{2,5}$ wb	17,0	57,9
$MP_{2,5}$ tr	2,7	9,1
MP_{25} sec	2,6	8,8
MP_{25} soa	6,0	20,4
MP_{25} reg	0,9	3,2
MP_{25} ns	0,2	0,7

Tabla 7. Valores promedio de concentración y contribución al MP₁₀ de los distintos conglomerados resueltos para el año 2019,

Conglomerado	Concentración Promedio anual [ug/m³]	Contribución promedio anual al MP₁₀ ambiental [%]
MP₁₀ wb	18,2	49,1
MP₁₀ tr	4,1	11,0
MP₁₀ sec	4,5	12,1
MP₁₀ soa	7,4	20,0
MP₁₀ reg	2,6	6,9
MP₁₀ ns	0,3	0,9

En la **Tabla 6 y 7**, se observa que el conglomerado resuelto que más contribuye a la concentración promedio anual ambiental de cada contaminante es la quema de leña, seguido por la contribución del MP_{soa} que también tiene una relación indirecta con la quema de leña, ya que este está principalmente formado por la oxidación de compuestos orgánicos volátiles que se aglomeran una vez emitidos a la atmosfera y que son producidos por procesos de combustión ineficientes (i.e. quema de leña húmeda). Además de las tablas mencionadas se desprende que la contribución promedio anual del conglomerado definido para el transporte es similar para ambos tipos de material particulado, siendo una fuente de emisión minoritaria en comparación a las otras fuentes de emisión analizadas.

Cabe señalar, que no fue incorporado el error porcentual en el análisis debido a que las variables poseen un alto grado de variabilidad estacional. Por otro lado, la **Tabla 6 y 7** sugieren que el conglomerado de MP_{2,5 ns} y MP_{10 ns} que corresponde a eventos aleatorios que no pueden ser explicados por el método de análisis de la contaminación ambiental, representa una contribución menor al 1% en ambos escenarios analizados.

A continuación, también se muestran series temporales con distintos grados de agrupación de los distintos conglomerados que contribuyen mayoritariamente a la concentración de material particulado fino ambiental durante el 2019.

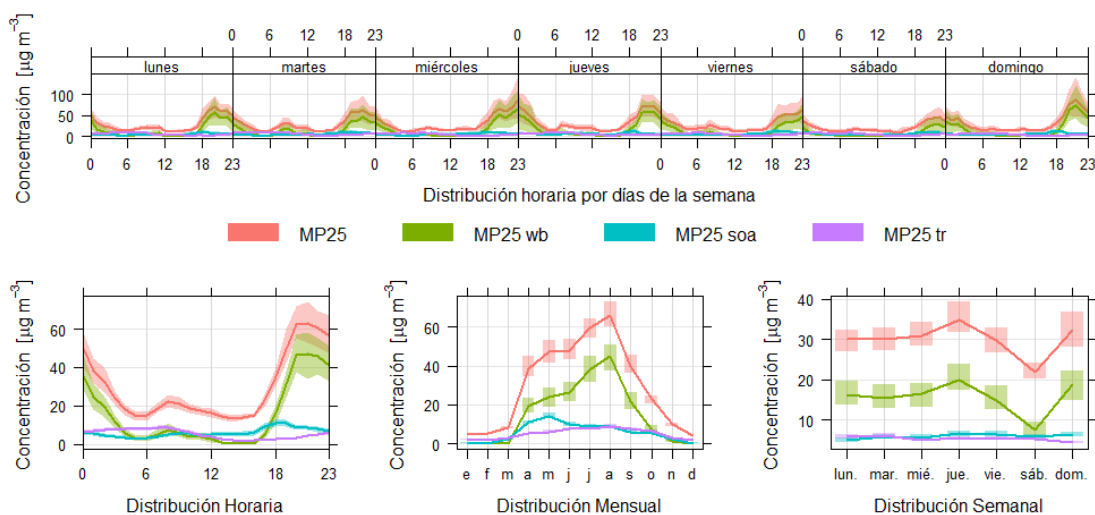


Figura 15. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la estimación de concentración de los $\text{MP}_{2,5 \text{ wb}}$, $\text{MP}_{2,5 \text{ soa}}$ y $\text{MP}_{2,5 \text{ tr}}$ resueltos por AC junto a la concentración de $\text{MP}_{2,5}$ ambiental durante el 2019.

A partir de esta **Figura 15**, según el análisis AC la mayor parte de la contaminación por material particulado fino corresponde a la fracción emitida por actividades relacionadas con quema de leña y se observa además que gran parte de la variabilidad de la concentración ambiental de $\text{MP}_{2,5}$ es influenciado principalmente por este tipo de contaminación teniendo picos máximos característicos de este tipo de contaminación a la media noche y durante los meses fríos sin una variabilidad marcada durante los días de la semana. La misma visualización, muestra una tendencia similar para el caso del MP_{10} y se encuentra en los anexos (Ver anexos, Figuras A11-A12).

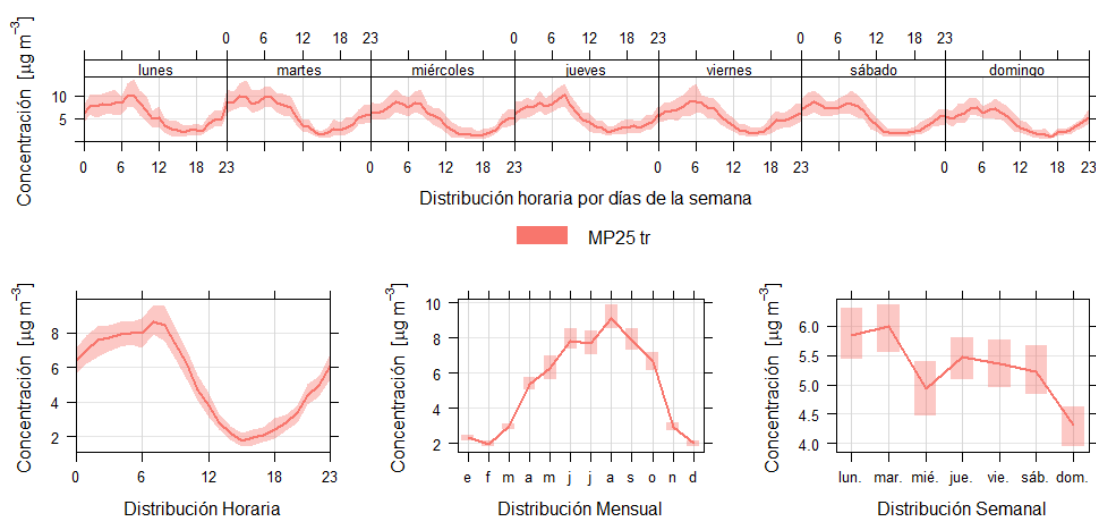


Figura 16. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la estimación de la concentración de $MP_{2,5}$ atribuible al tráfico vehicular AC durante el 2019.

La **Figura 16** muestra sólo la variación temporal del conglomerado de contaminación correspondiente $MP_{2,5}$ tr, donde se aprecia que la contaminación posee un pico a las 7:00 am aproximadamente y luego de las 6:00 pm comienza a aumentar, lo que corresponde también con las horas pico del tráfico vehicular. Además, analizando la distribución semanal, se tiene que la contaminación debido a este tipo de fuente tiende a disminuir los fines de semana, sobre todo los días domingo, y aumentar los días de la semana, lo que también es característico de las fuentes móviles en ruta.

A continuación, se presenta una serie temporal de las concentraciones de MP_{10} y $MP_{2,5}$ atribuidas al tráfico vehicular obtenidas del análisis de conglomerados utilizando la función *smoothTrend* de *openair* y activando la función *deseason* en el script para desestacionalizar la tendencia estacionaria de las variables graficadas y hacer válida la comparación interanual.

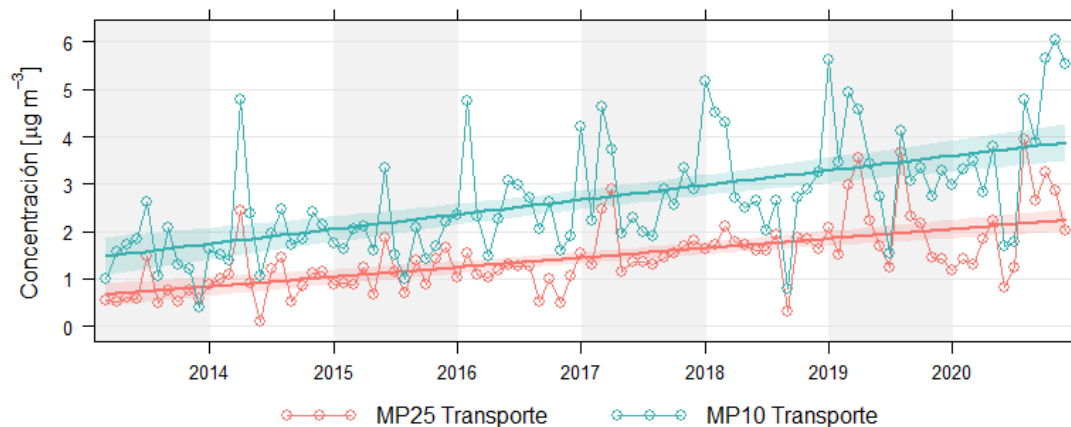


Figura 17. Serie temporal de la estimación de la concentración histórica de $MP_{2.5}$ y MP_{10} atribuible al tráfico vehicular por AC.

La **Figura 17** Muestra una tendencia de aumento de las concentraciones históricas de material particulado provenientes del tráfico vehicular, lo que podría estar relacionado con el aumento del tamaño del parque automotriz de la zona, tal como se muestra en el anexo (Ver Anexo, Tabla A2).

3.4.1 Determinación del material particulado *Escape* y *No-Escape*: Análisis de líneas de borde (ALB)

A partir de las concentraciones de aerosoles del sector transporte históricas determinadas por el análisis de conglomerado, se utilizó el modelo de reparto de líneas de borde para caracterizar y distinguir la contaminación *Escape* y *EscapeNo-escape*. El siguiente diagrama de dispersión muestra los resultados del método.

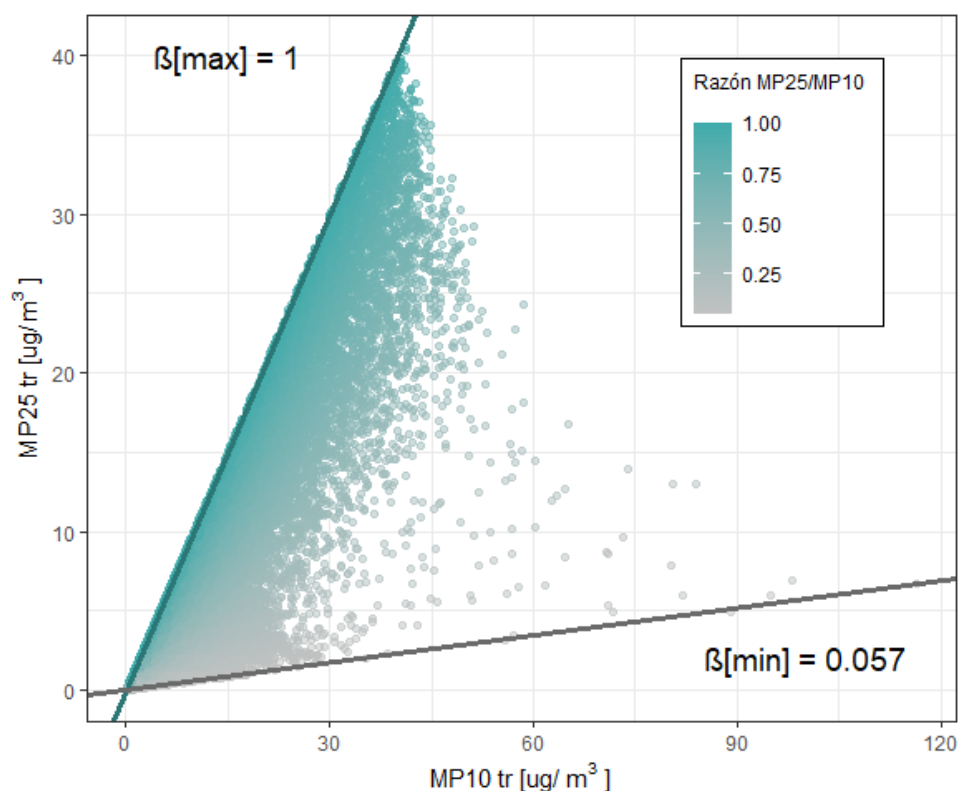


Figura 18. Diagrama de dispersión de la concentración de MP_{2,5} y el MP₁₀ proveniente del tráfico vehicular y la representación de las líneas de borde del modelo utilizado con sus respectivos coeficientes de regresión.

La línea de borde superior de la **Figura 18** representa escenarios donde la razón MP_{2,5} tr/MP₁₀ tr es cercana a 1, característica de emisiones tipo *Escape*, mientras que la línea de borde inferior posee una pendiente de 0,057 característica de emisiones *No-escape* (Jorquera et al., 2020). Los estimadores y la significancia de las regresiones lineales de las líneas de borde se encuentran en el anexo (Ver Anexos, Tabla A1).

Con los estimadores de las líneas de borde y el balance de masa desarrollado en la sección metodológica del estudio, se visualizó la concentración *Escape* y *No-escape* histórica del material particulado fino y total respirable. Las concentraciones se muestran a continuación en una serie temporal realizada con la función *smoothTrend*

de *openair* activando la función *deseason* en el script para desestacionalizar la tendencia estacionaria de las variables graficadas y hacer válida la comparación interanual

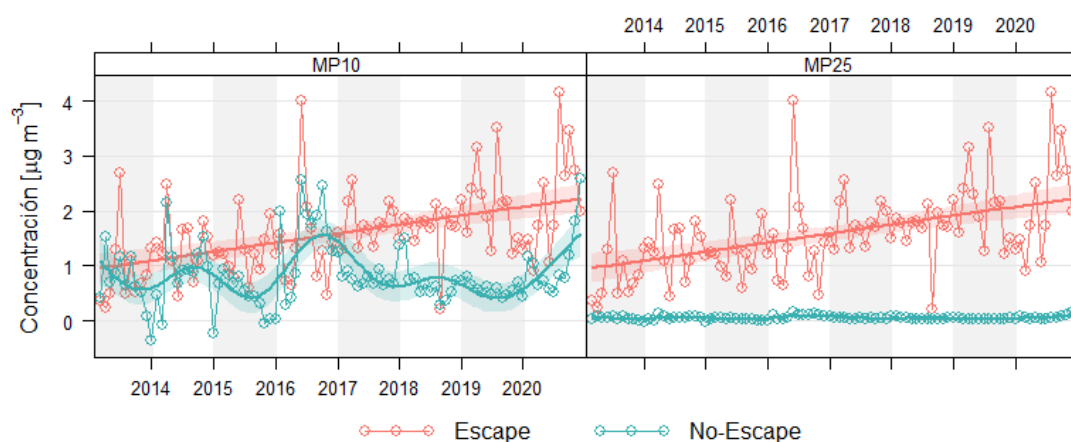


Figura 19. Series temporales de la concentración de material particulado fino y grueso emitido de forma *Escape* y *No-escape*.

La **Figura 19** muestra una tendencia de aumento del material particulado fino y grueso emitido en forma *Escape*. Esto podría deberse principalmente al aumento del número de vehículos en la ciudad de estudio, ya que como se indica en la **Tabla A2**, según el INE, 2019, el parque vehicular de la comuna de Valdivia ha crecido en aproximadamente 10,2 % desde el año 2010, lo que puede aumentar los estancamientos vehiculares, la cantidad de fuentes emisoras y con ello la concentración de los contaminantes *Escape* en la zona asociados a procesos de combustión en los vehículos.

Con respecto a la contaminación *No-escape* que está conformado principalmente por la re-suspensión de polvo de las calles (Hassan et al., 2020) se aprecia un ligero aumento con el transcurso del tiempo en el MP₁₀, mientras que en el caso del MP_{2,5} no muestra una tendencia clara y es mucho menor que la fracción gruesa,

estas tendencias probablemente tengan relación a que la variación de las emisiones No-Escape son más difusas, ya que dependen de muchos factores que no necesariamente están asociados al aumento del número de vehículos motorizados. Sin embargo, en ambas fracciones se observa una tendencia muy marcada de disminución y aumento que se corresponde con los periodos invernales y de verano, respectivamente. Notar que, para ambas fracciones de tamaño, las mayores concentraciones *No-escape* ocurren en verano, donde las precipitaciones son mínimas, facilitando la resuspensión del polvo de calles.

Finalmente, a continuación, se presenta la contribución relativa del material particulado total respirable y fino de *Escape* y *No-escape*.

Tabla 8. Contribución porcentual del material particulado total respirable y fino *Escape* y de *No-escape* a la concentración ambiental de contaminación medida por EMCA Valdivia I.

Tipo de emisión	MP _{2,5} (%)	MP ₁₀ (%)
<i>Escape</i>	8,7	7,8
<i>No-escape</i>	0,4	3,1

Los resultados de la **Tabla 8**, se comparan con la contribución de emisiones *Escape* propuesta por el AGIES especificado en la **Tabla 1**, se muestra que el método AC, podría estar sobrestimando las concentraciones promedio de material particulado emitido por el tubo de escape de vehículos lo que puede ser un indicio de sesgos en el modelo de estimación de datos de referencia.

3.4.2 Estimación de la concentración de CO emitido por fuentes vehiculares: Modelo de regresión lineal múltiple (MLR)

Para estimar la fracción de monóxido de carbono emitido por fuentes vehiculares en la ciudad de Valdivia, se propuso un modelo de regresión lineal múltiple (MLR) descrito en la sección de metodología.

La selección de las variables de concentración de $MP_{2,5}$ se realizó mediante el análisis de selección de variables por pasos (*stepwise*). Los resultados de este análisis se muestran en el Anexo (Ver Anexos, Figuras A19-A20), los cuales sugieren que el modelo lineal más adecuado para explicar la concentración ambiental de CO es aquel que contiene todas las concentraciones de $MP_{2,5}$ resultantes de AC.

A partir de estos hallazgos, se procedió a realizar el MLR. La salida del resumen del modelo se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 9. Resumen del modelo de regresión logrado. El valor de significancia es de 95%.

*p-valor<0,05. **p-valor<0.01.

Predicador	Estimador [ppm/($\mu\text{g}\cdot\text{m}^3$)]	Estimador* [adimensional]	CI 95% [LL, UL]
(Intercepto) [ppm]	0.1790**	-	[0.162, 0.191]
$MP_{2,5}$ tr	0.0074**	8,45	[0.010, 0.011]
$MP_{2,5}$ wb	0.0121**	13,85	[0.014, 0.013]
$MP_{2,5}$ reg	0.0022*	2,52	[0.003, 0.005]
$MP_{2,5}$ sec	0.0017**	1,94	[0.001, 0.002]
$MP_{2,5}$ ns	0.0067**	7,67	[0.009, 0.007]
$MP_{2,5}$ soa	0.0096**	10,92	[0.008, 0.008]

*Para lograr estos adimensionales, se transformó los ppm de CO a $\mu\text{g}/\text{m}^3$ utilizando una temperatura media de 25°C y 1 atm de presión.

Los resultados del modelo de la **Tabla 9** Sugieren que los estimadores son significativos ($p < 0.05$ y $p < 0.01$), rechazando la hipótesis nula que supone que cada

estimador tiende a cero. Esto indica, que los cambios en las variables explicativas del modelo de regresión (i.e. $MP25_{tr}$) están asociados a variaciones en la variable de respuesta que es la concentración de CO ambiental.

A continuación, se muestra una serie temporal del mes extraído de datos que se utilizó para validar el modelo.

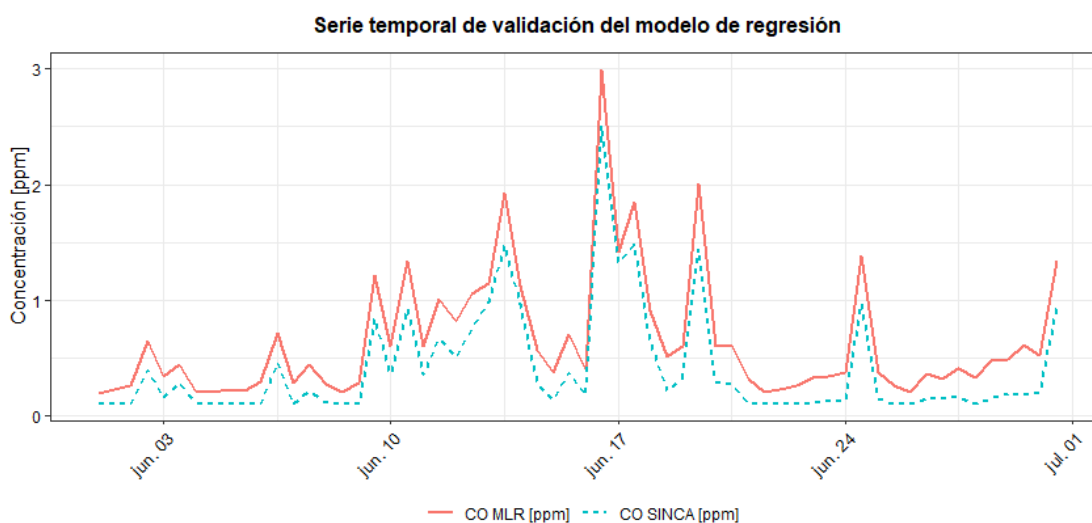


Figura 20. Serie temporal de validación de MLR de un mes aleatorio (Julio/2019) donde se muestran los niveles de monóxido de carbono ambientales medidos por la EMCA Valdivia I y los predichos por el MLR aplicado.

La **Figura 20** muestra que el modelo de regresión para el mes analizado predice gran parte de la variabilidad de los valores de concentración reales medidos por la red SINCA. La capacidad de predicción aumenta a medida que los valores de concentración reales son más grandes, lo que sugiere que el sesgo relativo del modelo aumenta cuando disminuye la concentración de monóxido de carbono ambiental. Además, hay una tendencia generalizada de sobrestimación de parte del modelo, ya que presenta un MB de 0.24 ppm y un MGE de 0.25 ppm en el conjunto de datos de la **Figura 2**. También, se realizó este mismo análisis con diferentes meses del 2019, en cada una de las

estaciones del año mostrando hallazgos similares en cuanto a sobrestimación y un aumento de sesgo del modelo en concentraciones pequeñas de predicción (Ver Anexo, Figuras A13-15).

A continuación, se presenta un diagrama de dispersión que compara los valores de los residuos del modelo de regresión con los valores de CO ambientales.

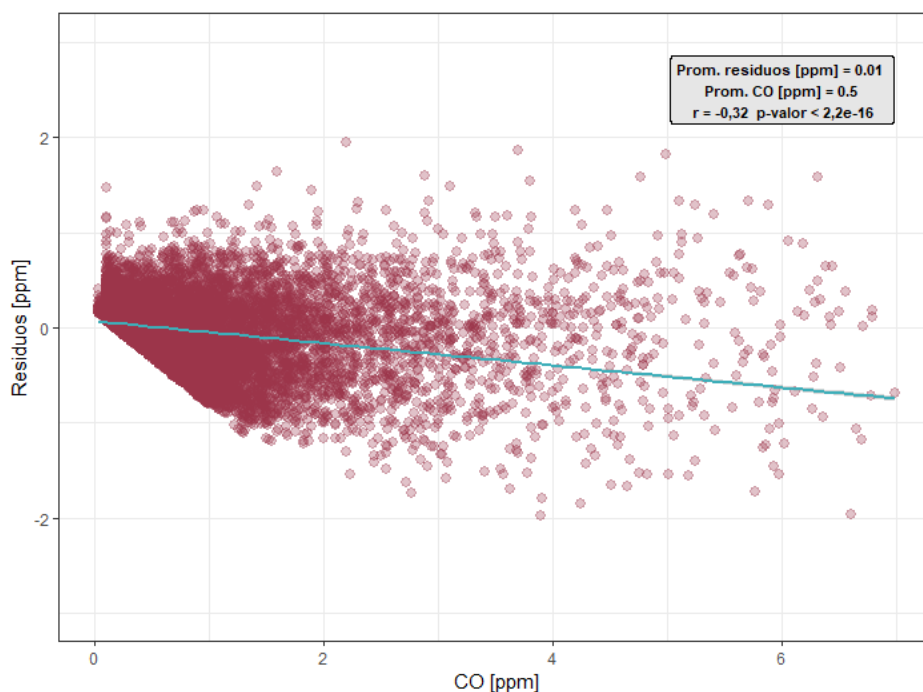


Figura 21. Diagrama de dispersión de los residuos del modelo de regresión y la concentración ambiental de monóxido de carbono en todo el periodo modelado

La **Figura 21** muestra que, en general, el promedio de los residuos se aproxima a cero, esto indica que el modelo de regresión presenta un buen desempeño para predecir los valores observados (Romero & Zúnica, 2013). La nube de puntos está entre dos rectas horizontales, formando una banda de errores aleatorios.

Por otro lado, se desprende que existe una correlación negativa débil entre los residuos y los valores observados de monóxido de carbono, lo que implica que existe

un sesgo del modelo de regresión. Este problema podría estar relacionado con la ausencia de variables relevantes adicionales que pueden estar involucradas en la explicación de la concentración ambiental de CO que no se han incluido en el modelo (Romero & Zúnica, 2013). También, se muestra en los anexos un gráfico tipo “hexbin” que muestra el número de datos en cada sección del diagrama de dispersión de forma más simple (Ver Anexo, Figura A16).

Además, la **Figura 21** muestra que ocurre un aumento de dispersión de los residuos a medida que la concentración ambiental de CO aumenta, lo que sugiere que el modelo presenta problemas de heterocedasticidad de residuos. Esto, si bien mantiene a los estimadores de MLR insesgados ($E(\hat{\beta}_i|x) = \beta_i$), puede afectar a la eficiencia de ellos, lo que puede implicar que existan otros estimadores que reproduzcan de mejor forma los valores de concentración de monóxido de carbono ambiental (Romero & Zúnica, 2013).

Por otro lado, para estudiar el supuesto de independencia de los errores de MLR, se realizó la prueba de Durbin-Watson; con la finalidad de evaluar los posibles problemas de autocorrelación de primer orden.

Tabla 10. Resultados de la prueba de Durbin Watson para el modelo de regresión utilizado.

Test de Durbin-Watson	
DW	2,31
p-valor	0,99
Ho: La autocorrelación es mayor que cero.	

Los resultados de la **Tabla 10** Muestran que con una significancia del 95% se rechaza la hipótesis nula, lo que indica que no existe dependencia temporal de primer orden en los residuos (autocorrelación) para el modelo de regresión utilizado, validando

el supuesto de independencia de residuos de Gauss-Markov en la regresión lineal múltiple.

Para validar finalmente los resultados de concentración de CO, se realizó un diagrama de dispersión de los valores predichos y los valores reales, el cual se muestra a continuación.

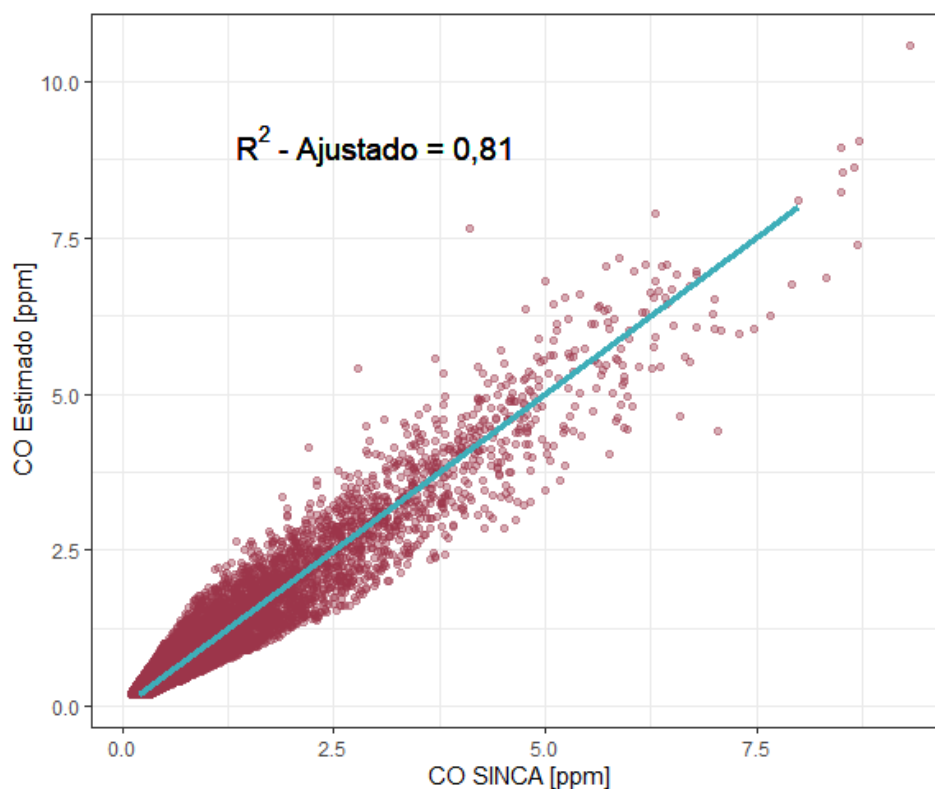


Figura 22. Diagrama de dispersión de la concentración de CO estimada por el modelo de regresión y el CO ambiental cuantificado por la EMCA Valdivia I. El segmento azul trazado en gráfico representa un factor de ajuste perfecto entre la predicción y la variable explicada.

La **Figura 22** indica un valor del coeficiente R^2 -Ajustado que sugiere que el modelo de regresión logra explicar el 81% de la variabilidad de los datos reales de concentración de monóxido de carbono, lo que indica un buen ajuste del modelo con un

alto potencial de predecir cambios en la variable dependiente. Por otro lado, también se logra apreciar cualitativamente la tendencia predictiva del modelo en relación con la variable explicada.

Finalmente, a partir de los parámetros obtenidos de MLR se procedió a estimar la contribución de fuentes al CO ambiental como se indica en la metodología.

Para resumir estos resultados, en la siguiente tabla se presentan los valores promedios de CO obtenidos por el análisis para cada estación del año 2019.

Tabla 11. Promedios de la concentración estimada para cada fracción de monóxido de carbono según estación del año para el año 2019.

Estación	Estimadores [ppm m ³ / ug]					
	CO _{Wb}	CO _{Tr}	CO _{Reg}	CO _{Sec}	CO _{Ns}	CO _{Soa}
Verano (DEF)	1,61E-05	1,56E-02	2,18E-03	1,96E-03	4,10E-04	3,65E-03
Otoño (MAM)	1,78E-01	3,65E-02	2,04E-03	3,01E-03	6,90E-04	8,88E-02
Invierno (JJA)	5,05E-01	6,28E-02	1,94E-04	5,29E-03	4,54E-03	8,44E-02
Primavera (SON)	1,21E-01	4,25E-02	2,24E-03	4,10E-03	2,05E-04	4,45E-02

De los resultados obtenidos de la **Tabla 11** se muestra principalmente que la tendencia generalizada en la cual los estimadores de la concentración de CO disminuyen en el verano, y aumenta en épocas frías, lo que podría deberse a que las condiciones de dispersión de las emisiones empeoran en invierno, sin embargo, en el caso del CO_{Reg} no, por lo que probablemente se trate de una mezcla de razones (incluyendo a las condiciones de estabilidad atmosférica). Por otro lado, si bien esté fenómeno de disminución en el verano ocurre tanto CO_{wb} como en el CO_{tr}, la magnitud del cambio es menor para este último, lo que puede deberse a que las emisiones

asociadas a consumo de leña aumentan al reducirse las temperaturas ambientales, cosa que no ocurre con el transporte (son esencialmente las mismas que en primavera, por ejemplo).

3.5 Evaluación del modelo AERMOD

Para realizar la evaluación de la concentración de contaminantes simuladas por AERMOD, se utilizaron diversas métricas cualitativas y estadísticas de evaluación empleados en el análisis de incertidumbre mostrado anteriormente y detallado en la sección de metodología en el presente estudio.

3.5.1 Evaluación cualitativa de AERMOD

Para evaluar cualitativamente las concentraciones obtenidas por las distintas configuraciones de AERMOD con los datos de referencia, se realizaron series temporales utilizando el paquete *ggplot2* en R. Los resultados de del análisis se muestran a continuación.

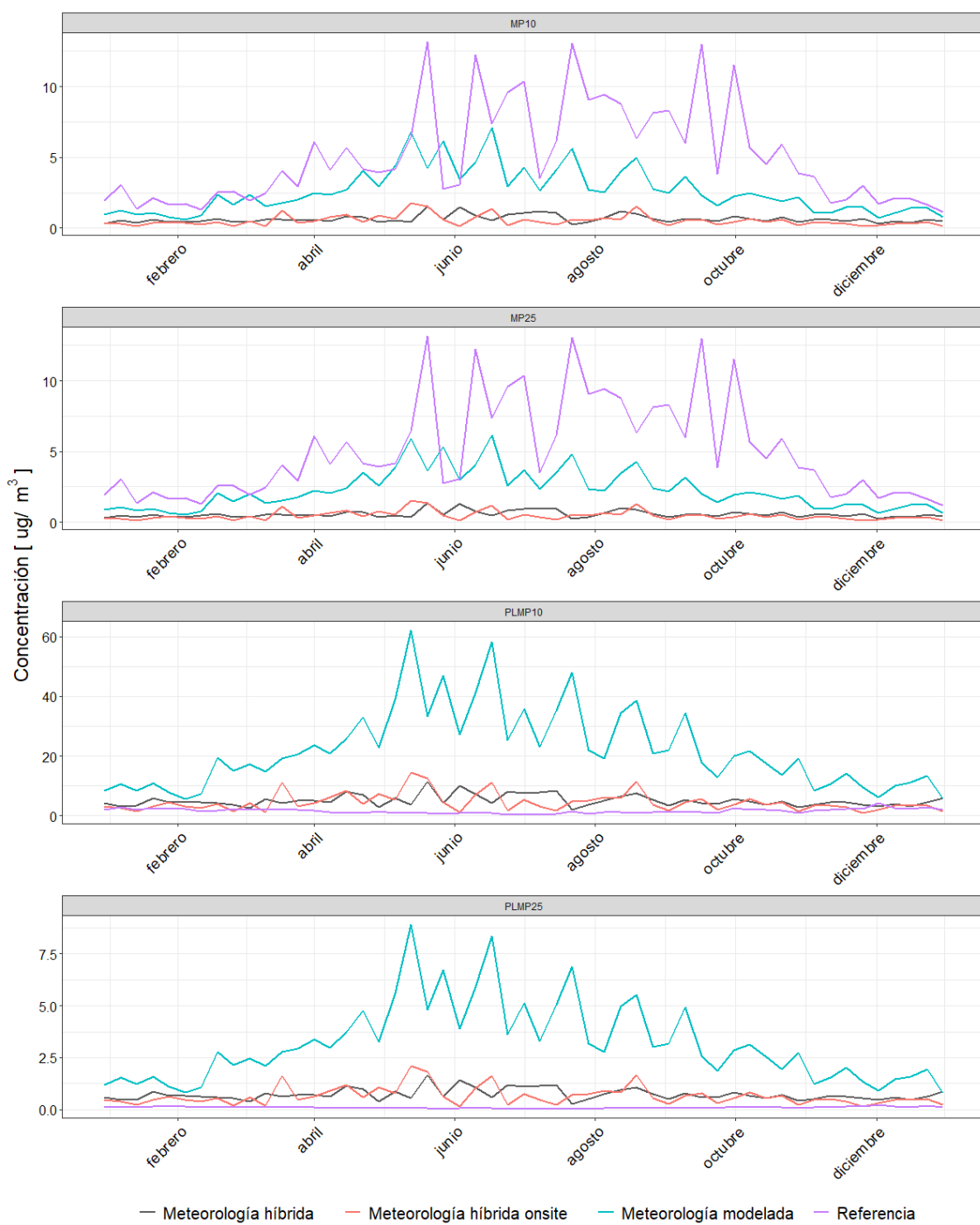


Figura 23. Series temporales de los aerosoles modelados por distintas configuraciones de AERMOD y sus respectivos valores de referencia resultantes del análisis realizado anteriormente (PL=No-escape).

La **Figura 23** muestra que para el caso de la contaminación de MP_{10} y $MP_{2,5}$ *Escape*, todas las configuraciones de AERMOD sub-predicen mayoritariamente los datos observados. Además, las series temporales muestran que la configuración que utiliza meteorología 100% modelada de AERMOD es la que alcanza un mayor nivel de semejanza con los valores de referencia.

Por otro lado, el caso contrario ocurre en las concentraciones *No-escape* de los aerosoles modelados, donde los valores estimados por AERMOD con meteorología modelada son mucho mayores que las concentraciones de referencia; y las concentraciones obtenidas con meteorología híbrida se asemejan más a los valores observados. Por esta razón, para analizar de forma eficiente las tendencias de las configuraciones que presentan un mayor grado de similitud, a continuación, se presenta conjunto de series temporales en distintas resoluciones diseñadas con la función *timeVariation* de *openair* para el MP_{10} *No-escape*.

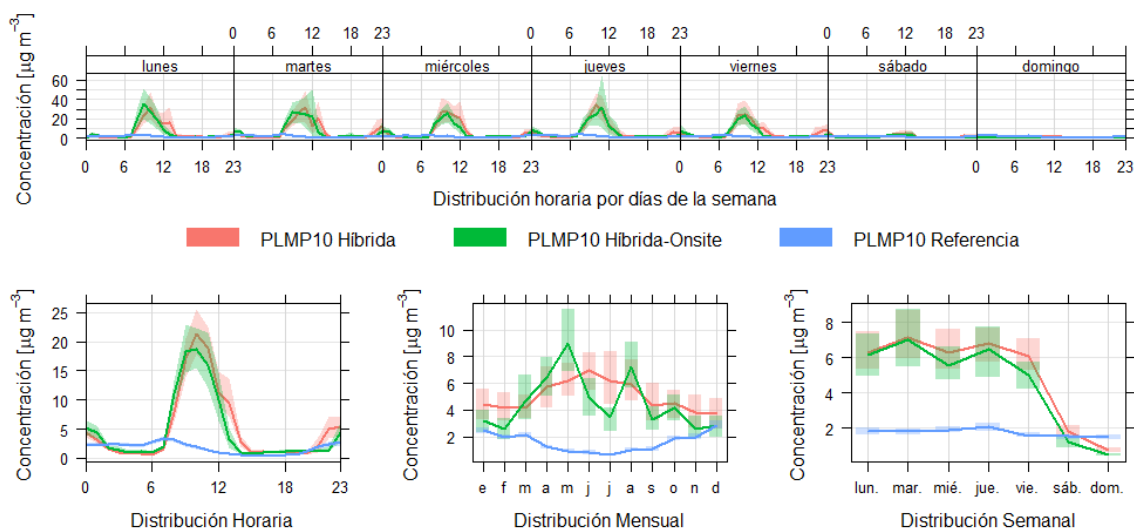


Figura 24. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración MP_{10} *No-escape* modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019.

Se puede apreciar de la **Figura 24** que estos valores modelados por AERMOD tienen magnitud mayor que las concentraciones de referencia en la mayoría de las resoluciones temporales (horaria y diaria). A pesar de eso, su principal diferencia que la caracteriza en comparación a otros contaminantes modelados, como los Aerosoles *Escape* y el CO_{tr} (Ver Anexos, Figuras A22-A25), es su variación mensual; donde las concentraciones observadas disminuyen en meses invernales y aumentan en meses cálidos, lo que no ocurre con ninguna de las configuraciones de AERMOD.

A continuación, se muestra la serie temporal para la evaluación de la reproducibilidad de los niveles de CO por AERMOD.

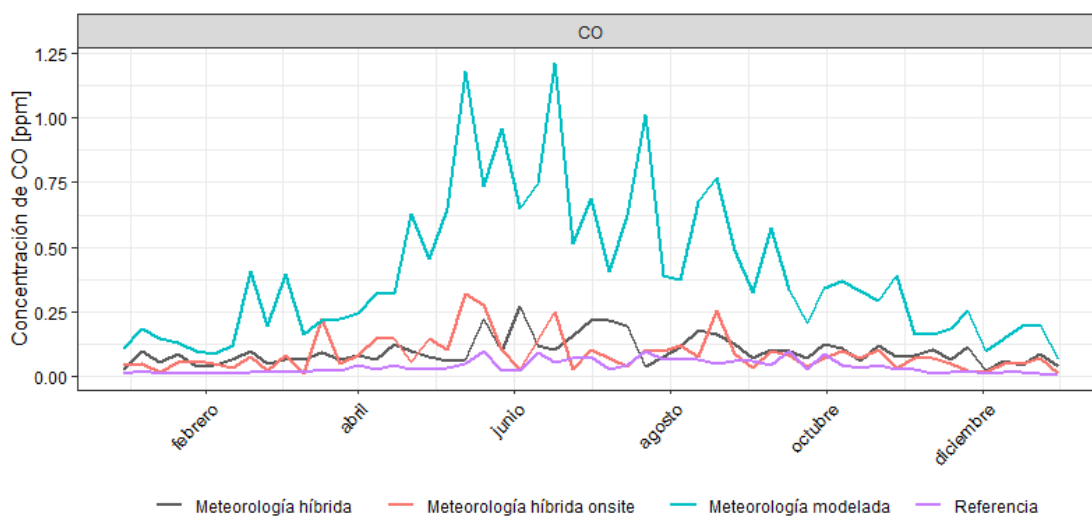


Figura 25. Series temporales semanales del monóxido de carbono modelado por distintas configuraciones de AERMOD y sus respectivos valores de referencia resultantes del análisis realizado anteriormente.

La **Figura 25** muestra que la concentración estimada por AERMOD con meteorología 100% modelada sobre-predice sustancialmente los niveles de contaminación de CO provenientes de fuentes vehiculares. No obstante, los niveles simulados por AERMOD con meteorologías híbrida (híbrida e híbrida onsite) varían en torno a valores similares a la concentración de referencia, discrepando de la tendencia genérica de los aerosoles *Escape* estudiados anteriormente.

Para complementar el análisis de las series temporales, se realizaron diagramas de Taylor de los promedios de las concentraciones diarias modeladas por las diversas configuraciones utilizadas en AERMOD. Los diagramas de las concentraciones modeladas de aerosoles emitidos de forma *No-escape* no se incluyeron dentro del análisis, ya que presentaron r-pearson negativos, por lo que los puntos no se visualizaron en el diagrama, esto significa que la variable modelada disminuye cuando la variable observada aumenta, lo que no tiene sentido físico para un parámetro que

pretende emular el comportamiento de una variable real. Este y otros estadísticos de aquellos resultados fueron incluidos y analizados en mayor profundidad en la evaluación cuantitativa del modelo, que se describe más adelante en la presente sección.

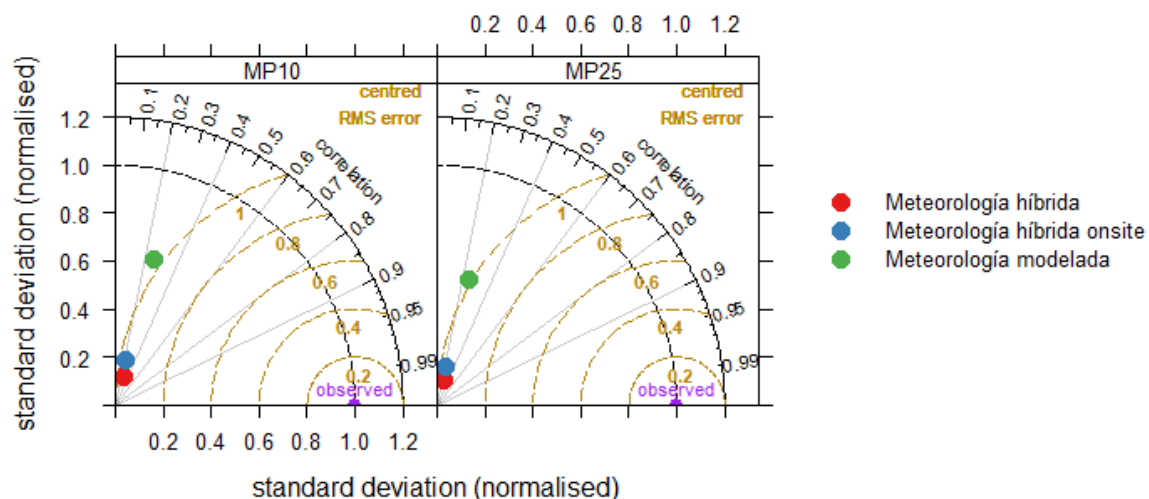


Figura 26. Diagramas de Taylor de los aerosoles Escape modelados por AERMOD en comparación con los valores de referencia.

Analizando el desempeño de las distintas configuraciones del modelo utilizando la **Figura 26**, el análisis es similar para ambos contaminantes modelados. Las tres configuraciones logran predecir de manera similar la tendencia de los datos de referencia (r-Pearson), debido a que, en los puntos se encuentran aproximadamente en la misma línea diagonal de correlación. Lo mismo ocurre con el RMSCE, que según las coordenadas polares del diagrama (color café), indican que las tres meteorologías tienen una capacidad de predicción similar.

Finalmente, los valores de desviación estándar normalizados indican que la variabilidad de los datos de concentraciones que utilizan meteorología modelada se asemeja más a los datos de concentración observados, debido a que el punto verde se

encuentra a una altura en el gráfico más cercana a 1, el valor de desviación estándar normalizada de los datos observados. Lo que refuerza el análisis de las series temporales semanales realizado anteriormente; en donde AERMOD con información meteorológica 100% modelada presenta un mejor desempeño de predicción que las otras dos configuraciones.

También, a partir de estos resultados, se logra apreciar que el desempeño de las diversas configuraciones del modelo muestran parámetros de evaluación similares para ambos aerosoles, con valores de r-Pearson y RSMEC muy parecidos entre estos contaminantes y difiriendo ligeramente en la magnitud de la desviación estándar, lo que indica que AERMOD con meteorología modelada predice ligeramente mejor la variabilidad de las concentraciones promedio diarias del MP_{10} *Escape* por sobre las concentraciones del $MP_{2,5}$ *Escape*.

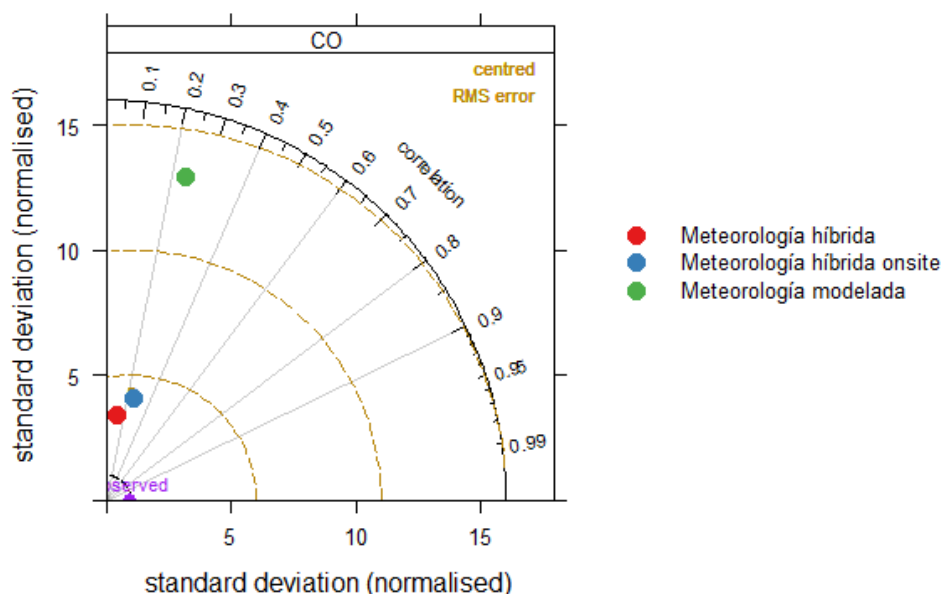


Figura 27. Diagrama de Taylor de las concentraciones diarias monóxido de carbono (CO) modelado por AERMOD en comparación con los valores de referencia.

Los resultados del diagrama de Taylor para el CO (**Figura 27**) muestran que existe una correlación similar de 0,2 entre los valores modelados por las distintas configuraciones de AERMOD utilizadas. Mientras que, los valores de RMSC y de σ_N indican que las configuraciones del modelo con meteorología híbrida e híbrida onsite, reproducen mejor el ruido y la variabilidad de las concentraciones de referencia.

3.5.1 Evaluación cuantitativa de AERMOD

Finalmente, se muestran los valores de los parámetros de evaluación obtenidos mediante la función *Modstats* del paquete *Openair* considerando valores promedios horarios, diarios y semanales de los datos de contaminación modelados y observados para realizar el análisis, tal como se plantea en Gibson et al., 2013. Y, además, se muestran una tabla asociada al promedio estacional de los resultados obtenidos por

AERMOD y su contribución porcentual a la concentración ambiental de cada contaminante del estudio con su respectiva incertidumbre.

Tabla 12. Resumen de los estadísticos de evaluación para los resultados de concentración promedio horaria, diaria y semanal de los aerosoles *Escape* modelados por AERMOD.

Meteorología	Promedio	MP ₁₀ <i>Escape</i>			MP _{2,5} <i>Escape</i>		
		Modelada	Híbrida	Híbrida onsite	Modelada	Híbrida	Híbrida onsite
FAC2	Horario	0,14	0,07	0,10	0,13	0,07	0,09
	Diario	0,40	0,11	0,07	0,37	0,09	0,05
	Semanal	0,51	0,00	0,00	0,45	0,00	0,00
MB	Horario	-2,57	-4,55	-4,67	-2,92	-4,64	-4,74
	Diario	-2,51	-4,49	-4,61	-2,86	-4,57	-4,68
	Semanal	-2,48	-4,43	-4,55	-2,82	-4,51	-4,62
MGE	Horario	6,08	5,13	5,04	5,87	5,11	5,04
	Diario	3,65	4,52	4,62	3,68	4,59	4,69
	Semanal	2,66	4,43	4,55	2,92	4,51	4,62
RMSE	Horario	11,19	8,91	8,79	10,54	8,87	8,78
	Diario	5,58	6,60	6,59	5,65	6,66	6,65
	Semanal	3,80	5,54	5,61	4,06	5,62	5,68
r	Horario	0,01	0,03	0,11	0,01	0,03	0,11
	Diario	0,25	0,13	0,28	0,25	0,13	0,28
	Semanal	0,55	0,40	0,43	0,55	0,40	0,43
COE	Horario	-0,20	-0,02	0,00	-0,16	-0,01	0,00
	Diario	0,01	-0,23	-0,25	0,00	-0,25	-0,27
	Semanal	0,07	-0,55	-0,59	-0,02	-0,58	-0,62

* Valores más cercanos a los resultados de un modelo que ideal de predicción.

La **Tabla 12** muestra para el caso de los contaminantes *Escape* modelados por AERMOD, que la configuración con información meteorológica 100% modelada presenta una mejor predicción que las otras configuraciones del modelo en cualquier resolución temporal, ya que, en la mayoría de los parámetros de evaluación analizados, esta logra los mejores valores en los grupos de datos (Valores destacados en color rojo).

Además, la capacidad de predicción del modelo con meteorología modelada aumenta a medida que se promedian los datos de contaminación, logrando un mejor desempeño para predecir la concentración media semanal de referencia de los

aerosoles *Escape*. Esto, se muestra en varios indicadores, como los altos niveles de correlación y *Fac2*, valores de MGE, MB y RMSE cercanos a cero, y niveles de eficiencia mayores a uno (COE), lo que sugiere un buen nivel de desempeño de predicción del modelo y que el modelo predice de mejor forma los valores semanales de concentración de material particulado *Escape* que su propia media aritmética.

Tabla 13. Resumen de los estadísticos de evaluación para los resultados de concentración promedio horaria, diaria y semanal de los aerosoles *No-escape* modelados por AERMOD.

Meteorología	Promedio	MP ₁₀ No-escape			MP _{2,5} No-escape		
		Modelada	Híbrida	Híbrida onsite	Modelada	Híbrida	Híbrida onsite
FAC2	Horario	0,16	0,10	0,20	0,12	0,07	0,20
	Diario	0,14	0,33	0,33	0,03	0,17	0,26
	Semanal	0,02	0,30	0,43	0,00	0,02	0,11
MB	Horario	18,20	3,14	2,46	2,76	0,60	0,50
	Diario	20,71	3,41	2,94	3,11	0,63	0,56
	Semanal	20,45	3,42	2,89	3,07	0,63	0,55
MGE	Horario	19,77	5,57	4,59	2,83	0,73	0,59
	Diario	20,79	4,05	3,90	3,11	0,65	0,59
	Semanal	20,45	3,46	3,16	3,07	0,63	0,56
RMSE	Horario	69,53	18,42	19,61	10,00	2,66	2,83
	Diario	31,47	6,31	7,82	4,59	0,97	1,17
	Semanal	24,59	4,15	4,43	3,62	0,70	0,71
r	Horario	-0,03	0,05	0,06	-0,03	0,05	0,06
	Diario	-0,20	-0,02	0,01	-0,20	-0,02	0,01
	Semanal	-0,63	-0,46	-0,31	-0,63	-0,46	-0,31
COE	Horario	-9,92	-2,08	-1,54	-26,34	-6,02	-4,72
	Diario	-22,24	-3,53	-3,36	-59,96	-11,64	-10,49
	Semanal	-30,34	-4,31	-3,84	-81,58	-15,94	-13,92

* Valores más cercanos a los resultados de un modelo que ideal de predicción.

* Valores inconsistentes.

De manera general, los indicadores de la **Tabla 13** muestran que el modelo en sus distintas configuraciones no es capaz de predecir los valores de concentración de referencia del material particulado emitido de forma *No-escape*, debido a la magnitud y

al signo de los estadísticos de evaluación analizados. Si bien existen valores de algunos parámetros (*Fac2*, *RSME*, *MB*, entre otros) que muestran leves ventajas predictoras del modelo con respecto a otros resultados, los valores de correlación de Pearson en todas las configuraciones y promedios son inconsistentes con lo esperado de un modelo predictor, debido a que la relación lineal entre estos es negativa o muy cercana a cero, lo que implica que aquellas ventajas mencionadas anteriormente, no son válidas.

Tabla 14. Resumen de los estadísticos de evaluación para los resultados de concentración promedio horaria, diaria y semanal de monóxido de carbono modelado por AERMOD.

Meteorología	Promedio	CO _{Tráfico}		
		Modelada	Híbrida	Híbrida onsite
FAC2	Horario	0,17	0,11	0,19
	Diario	0,10	0,31	0,31
	Semanal	0,00	0,25	0,42
MB	Horario	0,37	0,06	0,05
	Diario	0,37	0,06	0,05
	Semanal	0,36	0,06	0,05
MGE	Horario	0,40	0,12	0,10
	Diario	0,37	0,08	0,08
	Semanal	0,36	0,06	0,05
RMSE	Horario	1,45	0,43	0,44
	Diario	0,60	0,14	0,16
	Semanal	0,45	0,08	0,08
r	Horario	0,02	0,02	0,10
	Diario	0,24	0,12	0,26
	Semanal	0,55	0,41	0,42
COE	Horario	-9,59	-2,16	-1,65
	Diario	-12,41	-2,07	-1,81
	Semanal	-15,98	-1,94	-1,51

* Valores más cercanos a los resultados de un modelo que ideal de predicción.

La **Tabla 14** sugiere que las concentraciones promedio semanales de CO modeladas por AERMOD configurado con meteorología híbrida onsite presentan un

mejor desempeño de predicción en el conjunto de datos simulados, ya que la mayoría de los parámetros de evaluación utilizados lo indican.

En el caso del coeficiente de correlación de Pearson, la configuración con meteorología 100% modelada presenta un mejor desempeño que aquellas donde se incluyeron datos empíricos (Meteorología *Híbrida* e *Híbrida onsite*). A pesar de esto, desde el punto de vista del sesgo, la varianza y la eficiencia del modelo con respecto a los valores de referencia, esta configuración no es la óptima para reproducir la magnitud y la variabilidad temporal de las concentraciones de referencia, dando lugar a mejores predicciones en las configuraciones híbridas.

Por otro lado, analizando los valores de los indicadores en las dos configuraciones con meteorología empírica (híbrida e híbrida onsite) que presentan mejor desempeño, se puede apreciar que la mayor ventaja predictiva del modelo se da en escenarios de estimación semanales de los datos de referencia, alcanzando niveles óptimos de los parámetros en comparación con el análisis para valores diarios y horarios. Y, además, que la configuración con meteorología híbrida presenta una ligera ventaja predictiva en comparación con la configuración con meteorología híbrida onsite (según *Fac2* y *COE*).

Comparando las capacidades de predicción temporal semanal de las configuraciones que presentaron mejor desempeño para los aerosoles *Escape* y el CO emitido por el tráfico (**Tabla 12** y **14**) se aprecia que el modelo muestra mejores resultados en el caso de los aerosoles *Escape* según los valores de r-Pearson, *Fac2* y *COE*, ya que estos no dependen de la escala ni la unidad de la variable analizada. Para complementar este análisis, se estimó el NMB y el NMGE de las configuraciones

óptimas de modelación (Promedios semanales) para cada uno de estos contaminantes modelados. Los resultados, se muestran en la siguiente figura.

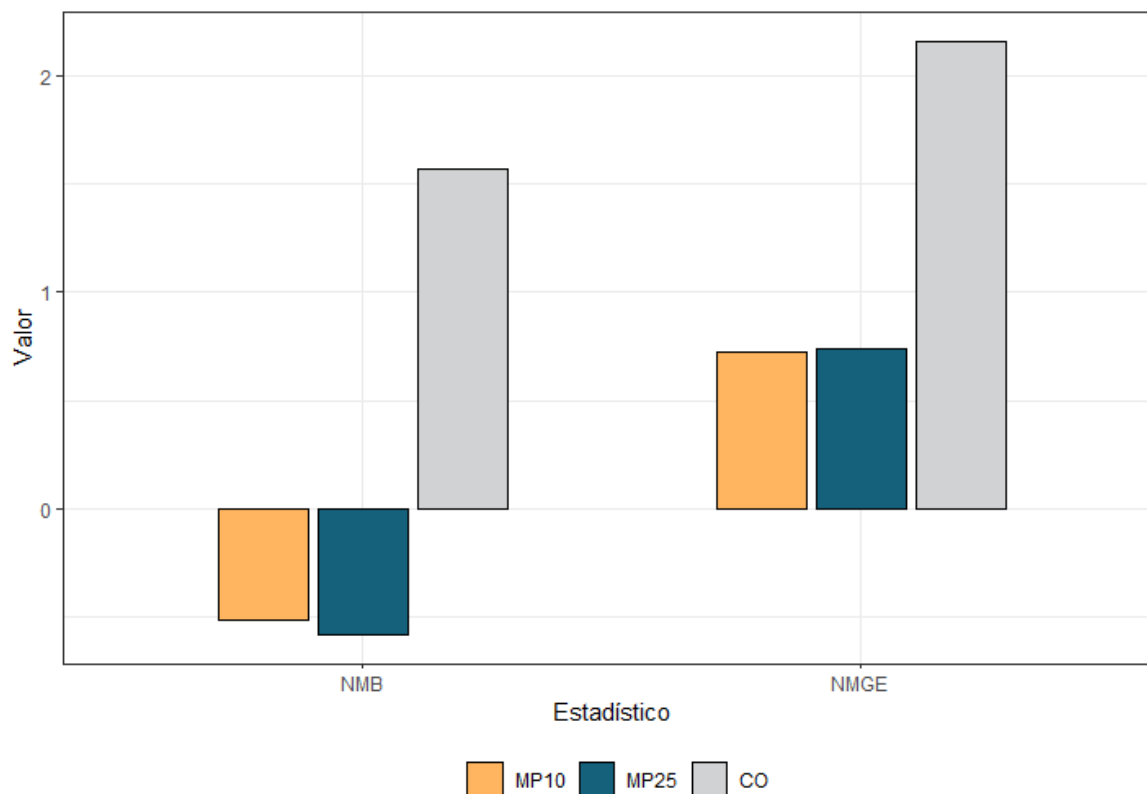


Figura 28. Gráfico de barras del sesgo medio normalizado (NMB) y el error medio bruto normalizado (NMGE) de cada predicción de valores semanales en cada contaminante señalado (MP₂₅ y MP₁₀ Escape y CO). Los valores analizados corresponden a concentraciones semanales con meteorología 100% modelada en el caso de los aerosoles y meteorología híbrida en el caso del monóxido de carbono.

La **Figura 28** muestra que la capacidad predictiva del modelo sigue la tendencia indicada por los estadísticos analizados anteriormente. Según los valores de NMB y NMGE la predicción de las concentraciones promedio semanales de los aerosoles *Escape* tienen un mejor desempeño que la predicción del monóxido de carbono emitido por el tráfico desde el punto de vista del sesgo del modelo. Por otro lado, la predicción

del MP₁₀ *Escape* mantiene una ligera ventaja predictiva con respecto al MP_{2,5} *Escape*. Además, el signo de los valores de NMB en la **Figura 28**. Indican que el modelo sub-predice mayoritariamente los valores de MP_{2,5} y MP₁₀ *Escape*; y sobre-predice los valores de CO_{tr} semanales de referencia.

Finalmente, se realizaron tablas de la concentración promedio horaria de cada tipo de material particulado modelado por AERMOD con meteorología 100% modelada y su respectiva contribución porcentual a las concentraciones ambientales desglosado para cada estación del año 2019 (**Tabla 15 y 16**), para hacer la posible la comparación de estos resultados obtenidos con otros estudios que han estimado la contribución y la concentración de material particulado asociado a las fuentes vehiculares a modo de *Benchmark*.

Tabla 15. Resumen de los valores medios horarios material particulado *Escape* modelado en distintas estaciones del año junto a su contribución porcentual al material particulado ambiental.

Contaminante	Estación	Concentración promedio [ug/m3]	Error Estándar [ug/m3]	Contribución Porcentual promedio [%]	Error porcentual [%]
MP25	Invierno	1,56	0,42	2,1	1,6
	Verano	0,20	0,05	3,5	1,7
MP10	Invierno	1,81	0,49	2,2	1,6
	Verano	0,22	0,06	1,4	0,6

Tabla 16. Resumen de los valores medios horarios material particulado *No-escape* modelado en distintas estaciones del año junto a su contribución porcentual al material particulado ambiental.

Contaminante	Estación	Concentración promedio [ug/m3]	Error Estándar [ug/m3]	Contribución Porcentual promedio [%]	Error porcentual [%]
PLMP _{2,5}	Invierno	0,46	0,11	0,6	0,5
	Verano	0,15	0,01	2,6	0,9
PLMP ₁₀	Invierno	3,23	0,80	4,0	2,7
	Verano	1,10	0,06	7,2	1,4

4. DISCUSIÓN

4.1 Análisis del sistema de modelación AERMOD

Varios estudios han utilizado AERMOD para simular la contaminación emitida por tráfico vehicular. Muchos de ellos, no incluyen una evaluación de los resultados obtenidos por el modelo o sólo analizan sus diferencias con respecto a la concentración ambiental de contaminantes (e.g. Vallamsundar et al., 2012; Contreras, 2015; Kumar et al., 2015). Este enfoque, si bien no logra obtener información relevante con respecto al desempeño del modelo, se puede utilizar como herramienta de búsqueda de puntos de alta contaminación en localidades con diversas fuentes. Este tipo de estudios es orientando principalmente a recomendar la creación y modificación de políticas públicas regulatorias ambientales, por medio de la priorización de estrategias de gestión vial mediante la estimación de zonas con altos niveles de contaminación según AERMOD (Vallamsundar et al., 2012). Otros estudios incorporan una evaluación de AERMOD, pero incluyen adicionalmente otras fuentes relevantes de contaminación (Cohan et al., 2011; Macêdo et al., 2020; Amouzovi et al., 2020), comparando los valores predichos por el modelo con la concentración ambiental total de contaminantes. Lo que, si bien tienen relevancia para evaluar impactos ambientales sobre la matriz atmósfera, no permiten desagregar el efecto de las distintas fuentes emisoras sobre la contaminación ambiental y evaluar su predicción individual. Sólo algunos se enfocan en evaluar la capacidad de reproducción temporal y espacial de AERMOD para las fuentes móviles en ruta (tráfico vehicular) (Chen et al., 2009 y Al-Jeelani, 2013). Estos últimos, lo realizan utilizando información empírica de monitoreo en sitios de muestreo muy cercanos a

carreteras principales, de tal forma de obtener muestras ricas en contaminación vehicular y distinguir fácilmente la contaminación de fondo (Background) de la contaminación emitida por el tráfico, determinando los incrementos atribuibles a las emisiones en las vías de tránsito cercanas. Esta metodología de trabajo, es una posibilidad de mejora al análisis realizado, ya que la metodología de obtención de datos de referencia en el presente estudio consiste en una combinación de un análisis estadístico de datos junto a modelos de reparto de fuentes que presentan una incertidumbre que aumenta a medida que las contribuciones porcentuales de las fuentes analizadas disminuyen (Belis et al., 2015). Por lo tanto, es de esperar que las estimaciones de concentraciones de referencia obtenidas a través de esta metodología contengan un alto grado de incertidumbre, haciendo complejo evaluar el desempeño del modelo AERMOD a partir de valores referencia desde el punto de vista del sesgo del modelo, considerando que según el inventario de emisiones de AGIES (PDA Valdivia) el tránsito vehicular representa sólo un 0,2% de las emisiones para el $MP_{2,5}$ *Escape*, y según los propios resultados de este método (AC-RM) corresponden a un 8,7% (**Tabla 8**). Esto sugiere la metodología de estimación de datos de referencia para el caso del transporte podría estar considerando concentraciones de otras fuentes que no pudieron ser resueltas por el análisis de conglomerados. Es por esto, que el monitoreo ambiental cercano a calles principales podría disminuir la incertidumbre de las estimaciones de concentraciones de referencia, dando la posibilidad de calibrar los niveles de contaminación resultantes de AERMOD, y aumentar la validez del proceso de evaluación del modelo.

Por otro lado, los resultados obtenidos muestran que para la contaminación *Escape* (MP_{10} y $MP_{2,5}$) simulada por AERMOD en todas sus configuraciones, existe una

subestimación del modelo a nivel cualitativo y cuantitativo en relación con los valores de referencia, lo que concuerda con resultados de la utilización de AERMOD para simular la variabilidad temporal de aerosoles en otros estudios (Kesarkar et al., 2007; Zhang et al., 2008; Chen et al., 2009). Por esta razón, la subestimación de los valores de referencia en el presente estudio para el caso de los aerosoles *Escape* es factible, y además, podría estar fuertemente relacionada con la formulación del modelo, lo que podría confirmarse evaluando el desempeño de otros modelos de tráfico utilizando la misma información de entrada (e.g. CALINE o R-LINE). Una explicación alternativa es que las emisiones de tubo de escape (*Escape*) estimadas por MODEM para Valdivia (año 2010) están subestimadas para el caso del año 2019. Esto podría explicar, al menos en parte, la subestimación del modelo AERMOD en este tipo de emisiones.

Adicionalmente, en relación con el análisis de los resultados de las concentraciones *No-escape*, AERMOD no presentó un desempeño consistente con el comportamiento de los niveles de contaminación de referencia, que no tienen necesariamente tiene relación con la incertidumbre asociada a la metodología de estimación de datos. Nosotros pensamos que esta deficiencia en la predicción del modelo no está directamente relacionada con la formulación de este, y creemos que el principal factor del sesgo y el déficit de correlación lineal se centra en la relación entre la emisión de polvo resuspendido y la meteorología, ya que las precipitaciones afectan significativamente a la emisión de polvo resuspendido del suelo (Kuhns et al., 2003; Norman et al., 2006), fenómeno que no es incorporado dentro de la modelación realizada.

Por otro lado, AERMOD se caracteriza por no incluir la reactividad química de los contaminantes en el proceso de dispersión de ellos (EPA U.S., 2018). Y dentro de las

especies que se simularon se encuentra el monóxido de carbono, que una vez emitido a la atmósfera sufre transformaciones químicas debido a las condiciones oxidantes de la troposfera, por lo que podría considerarse un factor influyente en los resultados del modelo. Sin embargo, la evidencia científica sugiere que estas reacciones están regidas por una cinética química lenta en comparación a los procesos de dispersión en la escala estudiada (Weinstock et al., 1969; Seinfeld & Pandis, 2006), por lo que es posible considerarlo como un contaminante inerte en este escenario. Nuevamente, parte del sesgo encontrado para estas modelaciones de AERMOD puede deberse a sesgos en la estimación de las emisiones del CO generadas por MODEM para el escenario Valdivia 2010, aplicadas en la presente investigación a condiciones del año 2019.

4.2 Análisis de información meteorológica y de emisiones

Realizando un análisis crítico de la información de emisiones, se encontró que MODEM, estima las emisiones vehiculares de los contaminantes de manera anual, y la validación y evaluación de los parámetros de emisión se realiza en base a razones de concentración ambiental (e.g. CO/MP₁₀ en hora punta en comparación a las razones de emisión CO_{tr}/MP_{10 tr}) de la red SINCA en combinación con la información científica disponible de la contaminación atmosférica en la zona simulada (e.g. modelos de reparto de fuentes) (DICTUC, 2006). En el caso de Valdivia, cuando se implementó MODEM y se originó el IEV utilizado en este estudio, no existían estudios de contribución de fuentes, por lo cual sólo se replicó la información de validación utilizada para otras ciudades (e.g. Rancagua), donde la contribución de fuentes varía con respecto a Valdivia según la evidencia científica actual (Jorquera et al., 2021; Kavouras et al., 2001). Esto, podría tener repercusiones en los resultados obtenidos por AERMOD, ya que, si la información de emisiones vehiculares no fuera representativa, sobre o

subestimando los valores de emisión reales, puede contribuir al sesgo del modelo de dispersión utilizado. No obstante, para este tipo de problemáticas, sería posible calibrar el inventario de emisiones como se indica en (DICTUC, 2008) por lo que, si este fuera el caso, la mejora de los resultados podría realizarse de manera simple multiplicando por un factor de corrección las emisiones vehiculares.

Con respecto al formato de salida de las emisiones en MODEM, este es anual, y no existe actualmente una metodología de desagregación para la inclusión de la variabilidad estacional-mensual de las emisiones vehiculares. Esto, podría no afectar significativamente a las emisiones *Escape*, ya que este tipo de contaminación no varía sustancialmente durante las diferentes estaciones del año (meteorología), pero si a la emisión del polvo resuspendido (Norman et al., 2006; Kuhns et al., 2003; Gromaire et al., 2000; Amato et al., 2009; Thorpe & Harrison, 2008). Además, De la Paz et al., 2015 sugiere que la acumulación de la cantidad de polvo en las carreteras cuando la lluvia finaliza es suficiente para suponer que no limita a las emisiones de nuevas resuspensiones, por lo que nosotros postulamos que la mayor parte del sesgo y la tendencia de predicción de contaminación *No-escape* podría subsanarse con la inclusión de un perfil estacional en MODEM para este tipo de emisiones vehiculares.

Por otro lado, en el informe Inventario de emisiones para la comuna de Valdivia (MMA, 2015a), donde se realizó una revisión de las opciones metodológicas de cálculo de emisiones de fuentes móviles en ruta más utilizadas a nivel nacional e internacional, se señala que MODEM es la metodología que en la actualidad más se utiliza en Chile. Sin embargo, se menciona que cuando se realizó el inventario no se encontraba disponible la base de datos de MODEM el 2013 para la ciudad de Valdivia, por lo que elaboraron el inventario utilizando otra metodología de cálculo que no se especifica, lo

que podría responder a las diferencias en las emisiones *Escape* mostradas en la **Tabla 3**. En cuanto a la contribución de las fuentes móviles a las emisiones totales, existe una gran diferencia debido a que los inventarios de emisión desarrollados en el PDA de Valdivia no incluyen a las emisiones de *No-escape* (resuspensión de polvo por vehículos), por lo que no es posible realizar esta comparación para este tipo de contaminación.

Con respecto a los datos meteorológicos de entrada, se observa, a partir del análisis de incertidumbre realizado y las distintas métricas mixtas (Ver Anexos, Figura A1-A2), que WRF simula con un gran desempeño la mayoría de las variables a nivel superficial, con excepción de la velocidad del viento donde el modelo sobrestima en promedio en 1,04 m/s la velocidad de viento superficial empírica. Nosotros creemos que la velocidad de viento medida por la EMCA Valdivia I, no es del todo representativa en base al análisis cualitativo de la **Figura 10**, debido a que este tipo variables es característica por poseer un ciclo de variación temporal muy marcado que se repite anualmente (Seinfeld & Pandis, 2006), lo que no ocurre con las mediciones de la EMCA Valdivia I, donde cada año, según los datos de medición, esta variable disminuye; por lo que conjeturamos que a pesar de que en la evaluación del desempeño de AERMOD para los distintos contaminantes modelados la configuración con meteorología 100% modelada no presentó siempre los mejores indicadores de desempeño, esta configuración es la que presenta un mayor grado de representatividad de las condiciones de campo en comparación a las otras híbridas utilizadas. Esta suposición es muy relevante, ya que podría afectar directamente a la evaluación de nuestros resultados y revela un interés grande para que futuros estudios analicen la

representatividad de EMCA Valdivia I para la velocidad de viento antes de implementar un modelo de dispersión.

Por otro lado, los resultados de AERMOD pueden ser también afectados por distintas condiciones de estabilidad atmosféricas (Claggett, 2014; Kumar et al., 2006). Este análisis no fue incluido en el presente trabajo, pero se hace énfasis en que puede ser incorporado en futuras evaluaciones de modelación con AERMOD en esta zona, para analizar el efecto de los tipos de estabilidad atmosférica en el desempeño del modelo.

4.3 Análisis de modelos de reparto de fuentes

Los resultados obtenidos por la metodología de líneas de borde muestra consistencia con respecto a las razones de emisión del inventario de emisiones del PDA Valdivia (MMA, 2017) y otros estudios (Amato et al., 2010; Thorne et al., 2008), logrando razones de $MP_{10}/MP_{2.5}$ *Escape* cercanas a 1 y de *No-escape* cercanas a 0,1.

Por otro lado, los resultados cualitativos obtenidos del análisis del diagrama de dispersión de errores vs valores predichos por MLR (**Figura 21**) sugieren que se infringe el supuesto de la heterocedasticidad de residuos del método de regresión lineal múltiple. Nosotros probamos diversas configuraciones y modelos de regresión para intentar corregir este comportamiento en los datos, pero no fue posible, ya que la tendencia no varió significativamente. Sin embargo, los hallazgos de Gelfand 2015, sugieren que en muchos casos esta característica de los datos no afecta significativamente a la capacidad de reproducir la variable explicada por un modelo clásico de regresión lineal múltiple. Esto, sumado al análisis de prueba de predicción temporal de la **Figura 20** nos hace creer que, a pesar de ser una limitación fuerte de la metodología utilizada, las

concentraciones estimadas por MLR están dentro del rango poblacional de datos reales de CO. No obstante, asumimos esta limitación y omitimos el cálculo de errores para las estimaciones de CO_{tr} y su predictor que podrían estar sesgados.

Analizando los resultados cuantitativos de MLR, el predictor para la variable $MP_{2,5\ wb}$ dio como resultado $\sim 13,85$, mientras que, para el $MP_{2,5\ tr}$ fue un total de $\sim 8,45$. De manera general, estos estimadores no muestran consistencia con la evidencia bibliográfica, ya que a pesar de que ambos son positivos, la razón de CO/MP_{25} para el tráfico es menor que la razón $CO/MP_{2,5}$ para la quema de leña, lo que contradice a lo expuesto en el inventario de emisiones (IE) del PDA Valdivia, donde la relación $CO/MP_{2,5}$ de las fuentes móviles en ruta es mayor que para la quema de leña residencial ($\sim 166,9$ y $\sim 23,3$, respectivamente) (MMA, 2015a). Este hecho sugiere, que los estimadores utilizados para cuantificar las concentraciones de CO_{tr} podrían estar sesgados, produciendo la subestimación de este contaminante emitido por el tráfico vehicular en los datos de referencia. Nosotros creemos que esta diferencia entre las razones de emisiones es relevante y el sesgo de los predictores de MLR podrían ser un factor importante que afecta la eficiencia de la evaluación cualitativa y cuantitativa de AERMOD para el CO_{tr} y disminuye su confiabilidad.

4.4 Aerosoles contaminantes modelados

Las configuraciones que mostraron un mejor desempeño para simular la contaminación vehicular de $MP_{2,5}$ *Escape* durante el 2019 según la evaluación realizada (Meteorología 100% modelada), obtuvieron concentraciones promedio horarias de $1,54 \pm 0,40 \text{ ug/m}^3$ en invierno (**Tabla 15**), lo que equivale a un $2,12 \pm 1,63 \%$ del material particulado fino ambiental en dicho periodo. Estos hallazgos, se encuentran dentro del rango porcentual de contribución del material particulado fino *Escape* determinado en

forma horaria en Jorquera et al., 2021, donde se obtuvo una concentración promedio de $2,28 \pm 0,10 \text{ug/m}^3$, equivalente a un $3,1 \pm 1,7\%$ del $\text{MP}_{2,5}$ ambiental. Si bien, la concentración simulada por AERMOD subestima significativamente a la concentración estimada por el estudio, la contribución porcentual es similar. Además, es relevante indicar que el sitio de muestreo donde se realizó el análisis de reparto de fuentes en Jorquera et al., 2021 se encuentra a 1 Km del receptor utilizado para realizar la modelación con AERMOD en el presente estudio, por lo que se puede inferir que las condiciones meteorológicas y topográficas son congruentes en ambos puntos, lo que sugiere que los resultados son comparables. En cuanto al valor promedio obtenido por AERMOD para el verano del 2019 fue de $0,21 \pm 0,05 \text{ug/m}^3$, equivalente al $2,12 \pm 1,63\%$ del $\text{MP}_{2,5}$ ambiental (**Tabla 15**). Por lo tanto, de acuerdo con AERMOD, la concentración vehicular Escape de material particulado fino disminuye significativamente con respecto al invierno, pero dicha tendencia es acompañada también por una disminución en el $\text{MP}_{2,5}$ ambiental, manteniéndose la contribución porcentual significativamente constante durante el año. Por esta razón, creemos que esta disminución está influenciada principalmente por factores meteorológicos, como la variación temporal de la altura de capa de mezcla atmosférica (ACM), que tiene relación con la estabilidad atmosférica y controla el grado de mezcla vertical de los contaminantes; disminuyendo su dispersión vertical en la temporada invernal (disminución de ACM) y aumentándola en verano (Aumento de ACM) (He et al., 2006; Wu et al., 2009), afectando a los niveles de concentración superficial de contaminantes como se muestra en AERMOD.

Por otro lado, estudios realizados en la ciudad de Temuco, Chile, muestran que la contribución del tráfico ($\text{MP}_{2,5}$ Escape) en invierno es pequeña en relación con la

concentración total de material particulado fino (3,7%) y ultrafino (~12%) (Villalobos et al., 2017, Díaz et al., 2012), lo que también es congruente con los resultados porcentuales obtenidos por el modelo ($2,12 \pm 1,63$ %). Y si bien, Temuco posee características vehiculares que difieren con respecto a la ciudad de Valdivia (Ver Anexos, Tabla A2), es un escenario donde el mayor aporte de emisiones de aerosoles y otros contaminantes (e.g. CO) es la quema de leña para calefacción doméstica, lo que también ocurre en Valdivia (Jorquera et al., 2021; MMA, 2017a; MMA, 2017b); además, las condiciones meteorológicas y de emplazamiento del sitio de muestreo son similares a las características del receptor analizado en el modelo; esto, hace posible la comparación de los resultados obtenidos con los hallazgos de los estudios de reparto de fuentes en Temuco como contraste adicional de la capacidad de estimación de concentraciones $MP_{2,5}$ *Escape* por AERMOD.

En el caso del aporte del MP_{10} *Escape* vehicular, no existen estudios científicos que cuantifiquen la contribución este tipo de contaminación al MP_{10} ambiental en la zona estudiada o localidades aledañas. Esto se debe principalmente a que la evidencia científica e inventarios de emisión de la zona (MMA, 2017a; MMA, 2017b; Villalobos et al., 2017) sugieren que la principal contribución *Escape* del sector transporte a los aerosoles contaminantes se emite en forma de $MP_{2,5}$, ya que estiman una razón de concentraciones $MP_{10}/MP_{2,5}$ *Escape* cercanas a uno. En este contexto, los resultados de concentración de AERMOD muestran niveles de contaminación MP_{10} *Escape* consistentes con esto último, ya que en todos los escenarios de modelación utilizados (Configuraciones) la razón entre las concentraciones $MP_{2,5}$ y MP_{10} *Escape* es cercana a 1.

En el caso del $MP_{2.5}$ *No-escape*, el promedio de concentración modelada por AERMOD con meteorología híbrida onsite, que presentó el mejor desempeño en la evaluación, durante el invierno del 2019 es de $0,49 \pm 0,47 \text{ ug/m}^3$ y en verano es de $0,15 \pm 0,01 \text{ ug/m}^3$ (**Tabla 16**). Para el caso del MP_{10} *No-escape*, los resultados modelados por AERMOD muestran que los niveles de concentración en invierno alcanzan una concentración de $3,28 \pm 0,85 \text{ ug/m}^3$ y en verano de $1,1 \pm 0,06 \text{ ug/m}^3$ (**Tabla 16**). El resultado para $MP_{2.5}$ es inferior a los hallazgos de Jorquera et al., 2021, que muestra que los niveles promedio de polvo resuspendido en invierno (caso del $MP_{2.5}$) son de alrededor de 3 ug/m^3 . Esto sugiere una subestimación de la emisión de MODEM para el $MP_{2.5}$ y MP_{10} *No-escape*. Sin embargo, los resultados muestran una baja eficiencia de predicción en base a los indicadores estadísticos (**Tabla 13**), debido principalmente a su tendencia estacional y además, como se mencionó anteriormente creemos que las configuraciones que incorporan meteorología empírica podrían no ser representativas.

4.5 Monóxido de carbono (CO)

En el caso del monóxido de carbono simulado por AERMOD con meteorología híbrida onsite, este presenta una tendencia similar a los demás contaminantes modelados, aumentando en invierno y disminuyendo en temporadas cálidas, con una contribución porcentual constante durante el año de aproximadamente 8% del CO ambiental lo cual indica que el tráfico vehicular es una fuente emisora minoritaria de este contaminante. En el caso de la zona estudiada, actualmente no existe evidencia bibliográfica que analice la contribución de fuentes emisoras para el CO ambiental mediante modelos de reparto, por lo que el contraste de las predicciones lo realizamos sólo en base al inventario de emisión utilizado en la elaboración del PDA de Valdivia realizado mediante una metodología de estimación de emisiones vehiculares distinta a

MODEM (MMA, 2017a). Este IE realizado en cumplimiento con el PDA de Valdivia (MMA, 2015a) estimó que las emisiones de fuentes móviles en ruta equivalen al 3,3% de las emisiones totales de CO, lo que es menor a la contribución porcentual de CO_{tr} obtenida por AERMOD (~8%), sin embargo, el AGIES del PDA Valdivia propone que esta contribución es mucho menor (**Tabla 1**) alcanzando aproximadamente el 0,2% de las emisiones. Este hecho sugiere que AERMOD sobrestima las emisiones del tráfico, no obstante, también da cuenta que probablemente exista un alto grado de incertidumbre en los inventarios mencionados, ya que hay diferencias significativas entre los datos del AGIES y el IE de la comuna de Valdivia (**Tabla 5**). La posible sobrestimación de la concentración de CO por AERMOD podría estar relacionado con diversos factores, entre los cuales consideramos en orden decreciente de probabilidad los siguientes: 1- Sobrestimación de las emisiones de CO_{tr} por el IEV utilizado, 2.- Subestimación de las emisiones de CO por fuentes móviles en los inventarios realizados en la elaboración del PDA de Valdivia, 3- Formulación del modelo para la simulación del CO, 4- Procesos de oxidación del CO una vez emitido a la atmósfera urbana, 5- Sesgo en la meteorología utilizada para la simulación.

Con respecto a la meteorología, como se ha discutido anteriormente, el modelo utilizado reproduce con un buen desempeño para la mayoría de las variables meteorológicas muestreadas y además, no sólo se utilizó la información modelada por WRF para simular en AERMOD, sino que también se incluyeron configuraciones que utilizan datos meteorológicos superficiales empíricos, por lo que creemos que la meteorología no es el principal factor influyente en este comportamiento, ya que en todas las configuraciones la contribución porcentual al CO ambiental es igual o mayor a ~8%.

Además, como se analizó anteriormente, la reactividad de este contaminante no debería ser una problemática a la escala que se está trabajando, por lo que conjeturamos que las transformaciones químicas del CO en la atmósfera tampoco son el principal factor responsable de esta tendencia en la modelación de CO_{tr} . Finalmente, con respecto a las emisiones estimadas por MODEM, éstas son similares e inclusive menores a las calculadas por la metodología utilizada en el PDA de Valdivia MMA, 2017b, lo que sugiere que el IEV utilizado tampoco es un factor principal que explica estas diferencias.

En base a esto, postulamos que el sesgo y el poco desempeño que presenta AERMOD para predecir las concentraciones de CO emitidas por el tráfico, podría estar asociado a la formulación del modelo. Sin embargo, el alcance de los resultados obtenidos y la metodología utilizada en el presente estudio no permite conjeturar más allá de este análisis realizado, por lo que para concluir sobre este comportamiento de sobrestimación del CO_{tr} por el modelo, se deben realizar estudios adicionales detallados de la formulación y el proceso de estimación temporal y espacial de gases para AERMOD.

4.6 Desempeño predictivo temporal de AERMOD

Analizando y comparando el desempeño de las distintas configuraciones establecidas en el presente estudio en diversas resoluciones temporales agrupando promedios diarios y semanales como se muestra en las **Tabla 12-14**, el sesgo del modelo se hace menos significativo en ciertos escenarios específicos; estos son, para las concentraciones de material particulado *Escape*, cuando se evalúan los promedios semanales. La proyección de estos resultados sugiere que al promediar semanalmente las concentraciones horarias de aerosoles *Escape* modelados por AERMOD se pueden

obtener estimaciones mucho más cercanas a las concentraciones reales; esto puede deberse a que las incertidumbres en el perfil temporal horario y diario utilizado de las emisiones del transporte en Valdivia que fueron incorporados a partir de la estimación de MODEM se suavizan al agrupar los datos de contaminación, lo que genera que los promedios semanales se acerquen más a los valores de referencia que los valores horarios de contaminación. En este sentido, nosotros creemos que esto, sumado a la disminución del sesgo del modelo mediante la incorporación de un factor de corrección para las emisiones de aerosoles *Escape* en el IEV (DICTUC, 2006) permitiría estimar semanalmente con un bajo nivel de incertidumbre futuras concentraciones de material particulado cuando el parque vehicular de Valdivia se someta a modificaciones que podrían afectar la actividad vehicular en ciertas zonas específicas de la ciudad.

4.7 Limitaciones y proyecciones:

Notamos diversas limitaciones del estudio que reducen y aportan incertidumbre al análisis cualitativo y cuantitativo de los resultados obtenidos. Esto es relevante, ya que, al tenerlas en cuenta, futuros estudios relacionados con la implementación de modelos de dispersión locales que utilicen la información de emisiones generada por MODEM intenten sustraerlas de la metodología con la finalidad de brindar mayor confiabilidad al análisis de evaluación realizado. Entre ellas:

- **Incertidumbre asociada a la estimación de las concentraciones de referencia:** La validez de la evaluación puede ser cuestionable considerando que la contribución de las emisiones del tráfico vehicular no sobrepasa el 5% del total de las emisiones de ambas fracciones de material particulado emitido por fuentes vehiculares *Escape* en los inventarios de emisiones y los estudios revisados de la zona estudiada, no así en los resultados que se utilizan como

concentraciones de referencia, donde en ambas fracciones analizadas se supera el 8% de contribución porcentual a la contaminación ambiental, lo que da indicios de que la metodología empleada posee un sesgo que influencia de manera importante la validez de la evaluación del modelo. Por lo tanto, se recomienda reevaluar este tipo de metodologías de levantamiento de datos de referencia o utilizar alguna de las mencionadas en los párrafos anteriores que brinde un mayor nivel de certeza (i.e. modelación y medición en puntos muy próximos a carreteras).

- **Monitoreo ambiental de trazador del tráfico:** Asociado al punto anterior, relacionado con una gran limitación del diseño metodológico de estimación de concentraciones de referencia, surge también otra posibilidad para mejorar la evaluación y potencialmente calibrar el modelo de dispersión utilizado. Como se ha mencionado anteriormente en otros estudios (Carbone et al., 2013; Villalobos et al., 2015), se ha utilizado el monitoreo de un marcador molecular de la fuente emisora modelada durante el tiempo de simulación con la finalidad de mejorar la estimación de modelos de dispersión. Esta podría ser una proyección para futuros estudios asociados al uso del sistema de modelación AERMOD utilizando el IEV generado por MODEM. Por ejemplo, la medición continua de trazadores tales como el carbono negro proveniente de los vehículos motorizados, mediante el uso de un etalómetro de varias bandas de absorción, podría mejorar las estimaciones de emisiones del transporte motorizado. Lo mismo podría decirse de la medición continua del aerosol orgánico emitido por el transporte a través del trazador HOA (Carbone et al., 2013).
- **Perfil temporal estacional de la actividad del parque vehicular:** Como se mencionó anteriormente, el resultado de la implementación de MODEM es un

IEV anual y un perfil temporal horario-semanal de la actividad de los distintos vehículos que componen el parque vehicular de la ciudad. Una limitación que se analizó particularmente en la simulación de contaminantes *No-escape* modelados es la ausencia de un perfil temporal que desagregue a nivel estacional y/o mensual la variación de las emisiones de polvo resuspendido del IEV utilizado que afecta directamente a la evolución temporal simulada por AERMOD y otros MDCA. Como se mencionó anteriormente, la inserción de una metodología de generación del perfil temporal estacional y/o mensual de las emisiones *No-Escape* en Valdivia podría mejorar los valores obtenidos en la evaluación del modelo para los contaminantes mencionados anteriormente y aumentar la eficiencia predictiva del modelo. Sin embargo, dada la complejidad (e intermitencia) del fenómeno de adición de partículas sobre la red vial, así como el proceso de resuspensión del polvo por parte de los vehículos motorizados, no parece obvio que se pueda definir un perfil temporal para esta fuente de emisión.

- **Información meteorológica del perfil atmosférico:** El sistema de modelación utilizado (AERMOD) requiere información meteorológica detallada del perfil atmosférico, por lo que para obtener dicha información se utilizó WRF debido a la nula disponibilidad de datos meteorológicos en altura en la red de monitoreo SINCA. Para disminuir la incertidumbre que genera WRF, sería interesante llevar a cabo mediciones de variables meteorológicas a través del perfil atmosférico y así evaluar de manera completa los modelos meteorológicos utilizados para realizar la modelación con AERMOD.
- **Incertidumbre en la velocidad de viento:** Nosotros encontramos que WRF para la zona estudiada presentaba grandes sesgos en la velocidad de viento

superficial en relación con los datos de EMCA Valdivia I. En función del análisis realizado, creemos que este hecho está influenciado principalmente por factores externos que afectan la representatividad de la estación y pueden producir fuertes diferencias en las concentraciones simuladas por un modelo de dispersión, como sugiere Zhou et al., 2001. A pesar de esto, con la información que se analizó no es posible concluir de forma determinista aquello, por lo que este hecho es una fuerte limitación para generar conclusiones en base a nuestra metodología. Esta limitación podría ser subsanada con monitoreo ambiental con métodos de referencia *in-situ* de las variables meteorológicas en lugares cercanos a EMCA Valdivia I, para analizar de forma detallada la representatividad de la estación y mejorar la confiabilidad de las conclusiones obtenidas en base a la evaluación de la implementación de AERMOD con datos de emisión generados por MODEM.

- **Sesgo y heterocedasticidad de MLR:** En base al análisis realizado, se determinó que no es posible explicar de manera eficiente las concentraciones de CO atribuibles a distintas fuentes emisoras mediante la metodología MLR propuesta. Este hecho, limitó la validez de la evaluación cualitativa y cuantitativa realizada para las simulaciones de CO_{tr}. Una proyección para futuros estudios de simulación de monóxido de carbono con MDCA sería la búsqueda y utilización de otros modelos estadísticos y variables que podrían explicar la contaminación ambiental de CO con mayor eficiencia acompañando la validación de estas metodologías con el monitoreo de contaminantes trazadores de la contaminación vehicular, como ya se ha indicado en la sección anterior. Además, está la posibilidad de aplicar metodologías como el monitoreo directo de las emisiones de vehículos mediante técnicas espectroscópicas (remote sensing

device, RSD), la que ha sido aplicado en Santiago para generar antecedentes en PDA de la Región Metropolitana actualmente vigente (Geasur, 2015).

- **Tiempo de modelación:** En el presente estudio sólo se modeló el año 2019 para realizar los análisis cuantitativos tanto para AERMOD como WRF. Lo recomendable en la guía de modelación del SEIA son dos años para intentar evaluar los principales efectos estacionales en las predicciones del modelo (SEA, 2012), lo cual no se logró debido a la capacidad de los recursos computacionales utilizados.

Finalmente, respecto a nuestra hipótesis, podemos señalar que esta se rechaza parcialmente, ya que, si bien AERMOD es capaz de reproducir de buena forma los promedios semanales de concentración de aerosoles *Escape* con datos generados por MODEM y WRF, para los demás contaminantes evaluados, el modelo en su configuración óptima no logra reproducir de buena forma la evolución temporal de la contaminación emitida por el tráfico vehicular. Además, de poseer posibles sesgos en los datos de referencia con los que se compararon los resultados.

5. CONCLUSIÓN

En la presente investigación se evaluó la utilización del modelo de dispersión AERMOD para simular la variabilidad temporal del MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO emitido por fuentes vehiculares en la ciudad de Valdivia, Chile durante el año 2019. Esto, con el fin de abordar la problemática relacionada a los grandes requerimientos de información del modelo de dispersión actualmente utilizado a nivel nacional para la cuantificación de los impactos ambientales producidos por esta fuente de contaminación urbana.

En relación con la utilización del modelo AERMOD, se logró implementar un sistema de modelación usando herramientas de simulación meteorológica y de emisiones vehiculares que representan características intrínsecas de la ciudad de Valdivia, las cuales se emplearon como fuente de información de entrada al modelo de dispersión usado, presentando un marco de trabajo para elaborar futuros estudios de evaluación de modelos locales de dispersión de contaminantes vehiculares en ciudades con planes de gestión Vial.

Además, se aplicó una metodología que permitió estimar los niveles de contaminación atribuibles al tráfico vehicular mediante la combinación de métodos empíricos de monitoreo continuo de calidad de aire junto a modelos de reparto de fuentes. Estos, fueron utilizados como concentraciones de referencia en el presente estudio para cumplir el objetivo principal.

Por otro lado, se contrastó la información modelada por AERMOD con la información de referencia de MP_{10} , $MP_{2,5}$ y CO emitido por fuentes vehiculares mediante diversas herramientas cualitativas y cuantitativas de análisis de conjuntos de datos, analizando e interpretando la incertidumbre de los resultados del modelo; hallando diferencias de los resultados simulados por AERMOD con respecto las concentraciones de referencia estimadas, encontrando deficiencias en los resultados obtenidos por la metodología de estimación de datos de referencia y discutiendo sobre las variables asociadas directamente al funcionamiento del modelo de dispersión que potencialmente pueden influenciar esta comparación.

Los indicadores utilizados para evaluar cuantitativamente las concentraciones modeladas por AERMOD indican que el modelo de dispersión presenta un nivel de desempeño aceptable sólo para el material particulado emitido de forma Escape (por tubo de escape), específicamente para las concentraciones promediadas en una resolución temporal semanal, logrando así, valores óptimos de r-pearson, *Fac2*, MB, MGE y RSME. De esta forma, en el futuro sería posible mejorar el modelo de dispersión aplicando factores de corrección al inventario de emisiones (de tubo de escape) usado en la modelación. En contraste, para los demás contaminantes modelados ($MP_{2,5}$ y MP_{10} *No-escape*; y CO) en el estudio, el desempeño no fue aceptable. Sin embargo, nosotros concluimos que los resultados obtenidos por el método de estimación de concentraciones de referencia son cuestionables, por lo que, para determinar las sentencias señaladas anteriormente, se debería volver a modelar utilizando el mismo marco de trabajo utilizado para AERMOD pero modificando el método de obtención de concentraciones de referencia a uno que posea un menor grado de incertidumbre.

Los antecedentes mencionados anteriormente reflejan una síntesis de los resultados obtenidos, que descartarían parcialmente la hipótesis planteada al inicio de la investigación. No obstante, las distintas limitaciones planteadas junto a la discusión de las posibles causas de los sesgos del modelo sugieren que el desempeño deficiente se puede atribuir a alguna de las siguientes razones:

1. Sesgo en las emisiones anuales del inventario de emisiones vehiculares realizado con MODEM.
2. Incertidumbre asociada a los datos de referencia levantados por la combinación del análisis de conglomerados con modelos de reparto de fuentes e inventarios de emisión.
3. Ausencia de un perfil temporal de emisiones vehiculares a nivel estacional y/o mensual (i.e. primavera, otoño, verano) para las emisiones *No-Exhaust* en el inventario de emisiones vehiculares realizado con MODEM.
4. Ausencia de datos experimentales del perfil atmosférico de la zona estudiada, para disminuir la incertidumbre asociada a las variables meteorológicas utilizadas en el modelo AERMOD junto a la posible sobrestimación de la velocidad del viento por el modelo meteorológico utilizado.
5. Heterocedasticidad y sesgo en el modelo de regresión MLR propuesto para determinar las concentraciones de referencia de CO.

Finalmente, en base a este análisis, se propuso mejoras al sistema de modelación implementado en la ciudad de Valdivia, con la finalidad de aportar una base científica en torno a futuros procesos evaluación de modelos de dispersión locales de contaminantes vehiculares en Chile.

6. BIBLIOGRAFÍA

- Angra, S., & Ahuja, S. (2017). Machine learning and its applications: A review. In 2017 International Conference on Big Data Analytics and Computational Intelligence (ICBDAC) (pp. 57-60). IEEE.
- Ayres, J. G., Maynard, R. L., & Richards, R. J. (Eds.). (2006). Air pollution and health (Vol. 3). World Scientific.
- Amato, F., Nava, S., Lucarelli, F., Querol, X., Alastuey, A., Baldasano, J. M., & Pandolfi, M. (2010). A comprehensive assessment of PM emissions from paved roads: real-world emission factors and intense street cleaning trials. *Science of the Total Environment*, 408(20), 4309-4318.
- Amouzouvi, Y. M., Dzagli, M. M., Sagna, K., Török, Z., Roba, C. A., Mereuță, A., ... & Edjame, K. S. (2020). Evaluation of Pollutants Along the National Road N2 in Togo using the AERMOD Dispersion Model. *Journal of Health and Pollution*, 10(27).
- Al-Jeelani, H. A. (2013). The impact of traffic emission on air quality in an urban environment.
- Belis, C. A., Karagulian, F., Amato, F., Almeida, M., Artaxo, P., Beddows, D. C. S., ... & Hopke, P. K. (2015). A new methodology to assess the performance and uncertainty of source apportionment models II: The results of two European intercomparison exercises. *Atmospheric Environment*, 123, 240-250.
- Carbone, S., Saarikoski, S., Frey, A., Reyes, F., Reyes, P., Castillo, M., ... & Hillamo, R. (2013). Chemical characterization of submicron aerosol particles in Santiago de Chile. *Aerosol and Air Quality Research*, 13(2), 462-473.

- Carslaw, D. C., & Ropkins, K. (2012). Openair—an R package for air quality data analysis. *Environmental Modelling & Software*, 27, 52-61.
- Chang, J. C., & Hanna, S. R. (2004). Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 87(1), 167-196.
- Charron, A., Polo-Rehn, L., Besombes, J. L., Golly, B., Buisson, C., Chanut, H., ... & Jaffrezo, J. L. (2019). Identification and quantification of particulate tracers of exhaust and non-exhaust vehicle emissions. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19(7), 5187-5207.
- Chen, H., Bai, S., Eisinger, D., Niemeier, D., Claggett, M., 2009. Predicting near-road PM_{2.5} concentrations: comparative assessment of CALINE4, CAL3QHC and AERMOD. *Transportation Research Record* 2123, 26e37.
- Claggett, M. (2014). Comparing predictions from the CAL3QHCR and AERMOD models for highway applications. *Transportation Research Record*, 2428(1), 18-26.)
- Cohan, Alexander, Jun Wu, and Donald Dabdub. "High-resolution pollutant transport in the San Pedro Bay of California." *Atmospheric Pollution Research* 2.3 (2011): 237-246.
- Contreras, S. D. (2015). Regional Scale Dispersion Modeling and Analysis of Directly Emitted Fine Particulate Matter from Mobile Source Pollutants Using AERMOD (Doctoral dissertation, UC Irvine).
- Dallmann, T. R., & Harley, R. A. (2010). Evaluation of mobile source emission trends in the United States. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 115(D14).

- De la Paz, David, et al. "Implementation of road dust resuspension in air quality simulations of particulate matter in Madrid (Spain)." *Frontiers in Environmental Science* 3 (2015): 72.
- Decreto 40, Reglamento del sistema de evaluación de impacto ambiental (SEIA), Ministerio del medio ambiente (MMA), Santiago de Chile, (2013). Pág. 29.
- Decreto 25, Plan de descontaminación atmosférica para la comuna de Valdivia, Ministerio del medio ambiente (MMA), Santiago de Chile (2017a).
- Decreto 26, Plan de descontaminación atmosférica para la comuna de Temuco y Padre de las casas, Ministerio del medio ambiente (MMA), Santiago de Chile (2017b).
- Díaz-Robles, L. A., Varela-Bruce, C., Gaete, C., Cereceda-Balic, F., Fu, J. S., Reed, G. D., & Wakabayashi, P. (2012) Source apportionment of ultrafine particles in Temuco, Chile, using chemical mass balance receptor modeling and MOUDI sampling.
- DICTUC (2008). Análisis metodología para la aplicación del modelo MODEC en regiones, Informe final, SECTRA.
- DICTUC, (2006). Investigación de instrumentos de planificación ambiental para ciudades intermedias, Etapa III, Informe final, SECTRA.
- DICTUC, (2010). Implementación del modelo de cálculo de emisiones vehiculares (MODEM) en ciudades con planes de transporte y planes de gestión de tránsito, Informe final, SECTRA.
- ENVIRON (2009). International Corporation. User's Guide, Comprehensive Air QualityModel with Extensions (CAMx), Version 5.00.

- EPA, US. (2018). AERMOD model formulation and evaluation. EPA-454/R-18-003. US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC.
- Fenger, J. (1999). Urban air quality. *Atmospheric environment*, 33(29), 4877-4900.
- Geasur (2015). Generación de antecedentes para la evaluación técnica-económica a la aplicación de medidas de control para fuentes móviles en PPDA Región Metropolitana, Informe Final, Ministerio del medio ambiente.
- Gelfand, Sharla Jaclyn. "Understanding the impact of heteroscedasticity on the predictive ability of modern regression methods." (2015).
- Gibson, M. D., Kundu, S., & Satish, M. (2013). Dispersion model evaluation of PM_{2.5}, NO_x and SO₂ from point and major line sources in Nova Scotia, Canada using AERMOD Gaussian plume air dispersion model. *Atmospheric Pollution Research*, 4(2), 157-167.
- Githeko, A. K., & Woodward, A. (2003). International consensus on the science of climate and health: the IPCC Third Assessment Report. *Climate change and human health: risks and responses*, 43-60.
- Govender, P.; Sivakumar, V. Application of k-means and hierarchical clustering techniques for analysis of air pollution: A review (1980–2019). *Atmos. Pollut. Res.* 2020, 11, 40–56.
- González, H. J. (2015). *Introducción a la contaminación atmosférica*. Ediciones UC.
- Gromaire, M. C., Garnaud, S., Ahyerre, M., and Chebbo, G. (2000). The quality of street cleaning waters: comparison with dry and wet weather flows in a Parisian

combined sewer system. *Urban Water* 2, 39–46. doi: 10.1016/S1462-0758(00)00038-8

- Han, Xianglu, and Luke P. Naeher. "A review of traffic-related air pollution exposure assessment studies in the developing world." *Environment international* 32.1 (2006): 106-120.
- Hanzel, V. A., & Durham, N. C. (2005). Peer review of the Mass Balance Model (EPA-CMB8. 2) and documentation US Environmental Protection Agency,
- Hassan, Hala, et al. "Vehicle-induced fugitive particulate matter emissions in a city of arid desert climate." *Atmospheric Environment* 229 (2020): 117450.).
- Henry, R. C. (2003). Multivariate receptor modeling by N-dimensional edge detection. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, 65(2), 179-189.
- Heist, D., Isakov, V., Perry, S., Snyder, M., Venkatram, A., Hood, C., ... & Owen, R. C. (2013). Estimating near-road pollutant dispersion: A model inter-comparison. *Transportation Research Part D: Transport and Environment*, 25, 93-105.
- He, L., Hu, M., Huang, X., Zhang, Y., Tang, X., 2006. Seasonal pollution characteristics of organic compounds in atmospheric fine particles in Beijing. *Science of the Total Environment* 359, 167-176.
- Holmes, N. S., & Morawska, L. (2006). A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: an overview of different dispersion models available. *Atmospheric environment*, 40(30), 5902-5928.
- Hopke, P. K. (2016). Review of receptor modeling methods for source apportionment. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 66(3), 237-259.

- Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) (2014). Climate change 2014: Climate Change (AR5).
- Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) (2007). Climate change 2007: Climate Change (AR4).
- Jorquera, H., & Villalobos, A. M. (2020). Combining Cluster Analysis of Air Pollution and Meteorological Data with Receptor Model Results for Ambient PM_{2.5} and PM₁₀. *International journal of environmental research and public health*, 17(22), 8455.
- Jorquera, H., Villalobos, A. M., & Schauer, J. J. (2021). Wood burning pollution in Chile: A tale of two mid-size cities. *Atmospheric Pollution Research*, 12(4), 50-59.
- Kavouras, I. G., Koutrakis, P., Cereceda-Balic, F., & Oyola, P. (2001). Source apportionment of PM₁₀ and PM₂₅ in five Chilean cities using factor analysis. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 51(3), 451-464.
- Kesarkar, A. P., Dalvi, M., Kaginalkar, A., & Ojha, A. (2007). Coupling of the Weather Research and Forecasting Model with AERMOD for pollutant dispersion modeling. A case study for PM₁₀ dispersion over Pune, India. *Atmospheric Environment*, 41(9), 1976-1988.
- Ketzler, M., Omstedt, G., Johansson, C., Düring, I., Pohjola, M., Oetl, D., ... & Berkowicz, R. (2007). Estimation and validation of PM_{2.5}/PM₁₀ exhaust and non-exhaust emission factors for practical street pollution modelling. *Atmospheric Environment*, 41(40), 9370-9385.
- Kuhns, H., Etyemezian, V., Green, M., Hendrickson, K., McGown, M., Barton, K., & Pitchford, M. (2003). Vehicle-based road dust emission measurement—Part II:

Effect of precipitation, wintertime road sanding, and street sweepers on inferred PM₁₀ emission potentials from paved and unpaved roads. *Atmospheric Environment*, 37(32), 4573-4582.

- Künzli, N., Kaiser, R., Medina, S., Studnicka, M., Chanel, O., Filliger, P., ... & Sommer, H. (2000). Public-health impact of outdoor and traffic-related air pollution: a European assessment. *The Lancet*, 356(9232), 795-801.
- Kumar, A., Dixit, S., Varadarajan, C., Vijayan, A., & Masuraha, A. (2006). Evaluation of the AERMOD dispersion model as a function of atmospheric stability for an urban area. *Environmental Progress*, 25(2), 141-151.
- Kumar, A., Dikshit, A.K., Fatima, S., Patil, R.S. (2015). Application of WRF model for vehicular pollution modeling using AERMOD. *Atmos. and Cli. Sci.*, 5, 57–62.
- Lakes Environmental (2012). AERMOD View Technical Specifications and Features.
- Legates, D. R. and G. J. McCabe JR (1999). "Evaluating the use of goodness-of-fit measures in hydrologic and hydroclimatic model validation". In: *Water Resources Research* 35.1, pp. 233–241 (cit. on p. 231).
- Legates, D. R. and G. J. McCabe (2012). "A refined index of model performance: a rejoinder". In: *International Journal of Climatology* (cit. on p. 231).
- Macêdo, Maíra Feitosa Menezes, and André Luis Dantas Ramos. "Vehicle atmospheric pollution evaluation using AERMOD model at avenue in a Brazilian capital city." *Air Quality, Atmosphere & Health* 13.3 (2020): 309-320.
- Ministerio de medio ambiente (MMA) (2014). Informe Técnico para declarar Zona Saturada por MP₁₀ y MP_{2,5} para la comuna de Valdivia.

- Ministerio de medio ambiente (MMA) (2015). Inventario de Emisiones Atmosféricas para la comuna de Valdivia.
- Ministerio de medio ambiente (MMA) (2015b). Análisis General de Impacto Económico y Social (AGIES) del anteproyecto de plan de descontaminación de Valdivia por $MP_{2,5}$ y MP_{10} .
- Myers, R. H., & Myers, R. H. (1990). Classical and modern regression with applications (Vol. 2, p. 488). Belmont, CA: Duxbury press.
- Nalin, F., Golly, B., Besombes, J. L., Pelletier, C., Aujay-Plouzeau, R., Verlhac, S., ... & Albinet, A. (2016). Fast oxidation processes from emission to ambient air introduction of aerosol emitted by residential log wood stoves. *Atmospheric Environment*, 143, 15-26.
- National Research Council (NCA). (2000). Modeling mobile-source emissions. National Academies Press.
- Non-exhaust emission measurement system of the mobile laboratory SNIFFER. *Atmospheric Environment*, 43(31), 4703-4713.
- Norman, M., and Johansson, C. (2006). Studies of some measures to reduce road dust emissions from paved roads in Scandinavia. *Atmos. Environ.* 40, 6154–6164. doi: 10.1016/j.atmosenv.2006.05.022
- Sistema de Información Nacional de Calidad del Aire (SINCA) (2021). Red de información de calidad del aire, Región de los Ríos.
- Onat, A. (2006). A review of fugitive emissions. *Sealing Technology*, 2006(10), 7-9.
- Ontario Ministry of the Environment, Procedure for Preparing an Emission Summary and Dispersion Modelling Report, Version 3.0, MOE (2009).

- Organización de las Naciones Unidas (ONU). (2018). 2018 revision of world urbanization prospects, and 2017 revision of world population prospects.
- Padoan, E., & Amato, F. (2018). Vehicle non-exhaust emissions: impact on air quality. In *Non-Exhaust Emissions* (pp. 21-65). Academic Press.
- Pant, P., & Harrison, R. M. (2013). Estimation of the contribution of road traffic emissions to particulate matter concentrations from field measurements: a review. *Atmospheric environment*, 77, 78-97.
- Pirjola, L., Kupiainen, K. J., Perhoniemi, P., Tervahattu, H., & Vesala, H. (2009).
- Romero Villafranca, R., & Zúnica Ramajo, L. R. (2013). Métodos estadísticos para ingenieros. *Colección Académica. Editorial UPV*.
- Sato, Y., & Yamamoto, K. (2005). Population concentration, urbanization, and demographic transition. *Journal of Urban Economics*, 58(1), 45-61.
- Schmitz, R., Muñoz, R. y Falvey, M., (2011). Informe Técnico “Uso de Modelos de Calidad del Aire en la Evaluación Ambiental de Proyectos - Elaboración de un Documento Guía para el Uso de Modelos de Calidad del Aire en el SEIA”.
- Seinfeld, J., & Pandis, S. (2006). *Atmospheric chemistry and physics : from air pollution to climate change*, Segunda edición, J. Wiley.
- Servicio de evaluación ambiental (SEA), (2012). Guía para el uso de modelos de calidad del aire para el SEIA.
- Thorpe, A., & Harrison, R. M. (2008). Sources and properties of non-exhaust particulate matter from road traffic: a review. *Science of the total environment*, 400(1-3), 270-282.
- U.S. EPA. (2021). EMC Promulgated Test Methods. <https://www.epa.gov/emc/emc-promulgated-test-methods>

- Vallamsundar, S., & Lin, J. (2012). MOVES and AERMOD used for PM2.5 conformity hot spot air quality modeling. *Transportation research record*, 2270(1), 39-48.
- Villalobos, A. M., Barraza, F., Jorquera, H., & Schauer, J. J. (2015). Chemical speciation and source apportionment of fine particulate matter in Santiago, Chile, 2013. *Science of the Total Environment*, 512, 133-142.
- Villalobos, A. M., Barraza, F., Jorquera, H., & Schauer, J. J. (2017). Wood burning pollution in southern Chile: PM2.5 source apportionment using CMB and molecular markers. *Environmental Pollution*, 225, 514-523.
- Weinstock, Bernard. "Carbon monoxide: Residence time in the atmosphere." *Science* 166.3902 (1969): 224-225.
- Wickham, H. (2011). *ggplot2*. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, 3(2), 180-185.
- World Resources Institute (WRI) (2019). Scope 1 & 2 GHG Inventory Guidance.
- Wu, J., Houston, D., Lurmann, F., Ong, P., Winer, A., 2009. Exposure of PM2.5 and EC from diesel and gasoline vehicles in communities near the ports of Los Angeles and Long Beach, California. *Atmospheric Environment* 43, 1962-1971.
- Yamashita, T., Yamashita, K., & Kamimura, R. (2007). A stepwise AIC method for variable selection in linear regression. *Communications in Statistics—Theory and Methods*, 36(13), 2395-2403.
- Y. Jeng., & Martin, A. (1985). Residuals in multiple regression analysis. *Journal of pharmaceutical sciences*, 74(10), 1053-1057.

- Zhang, Q., Wei, Y., Tian, W., & Yang, K. (2008). GIS-based emission inventories of urban scale: A case study of Hangzhou, China. *Atmospheric Environment*, 42(20), 5150-5165.
- Zhou, H., & Sperling, D. (2001). Traffic emission pollution sampling and analysis on urban streets with high-rising buildings. *Transportation Research Part D: Transport and Environment*, 6(4), 269-281.

7. ANEXO

Sección 7.1: Métricas cualitativas adicionales del análisis de incertidumbre

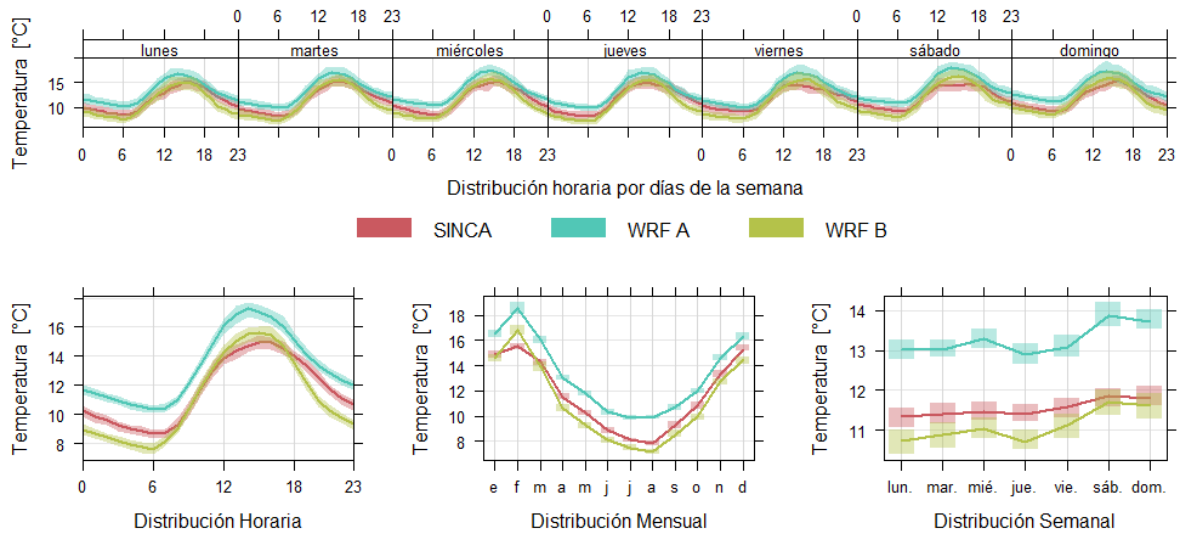


Figura A1. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la temperatura modelada por WRF y muestreada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el 2019.

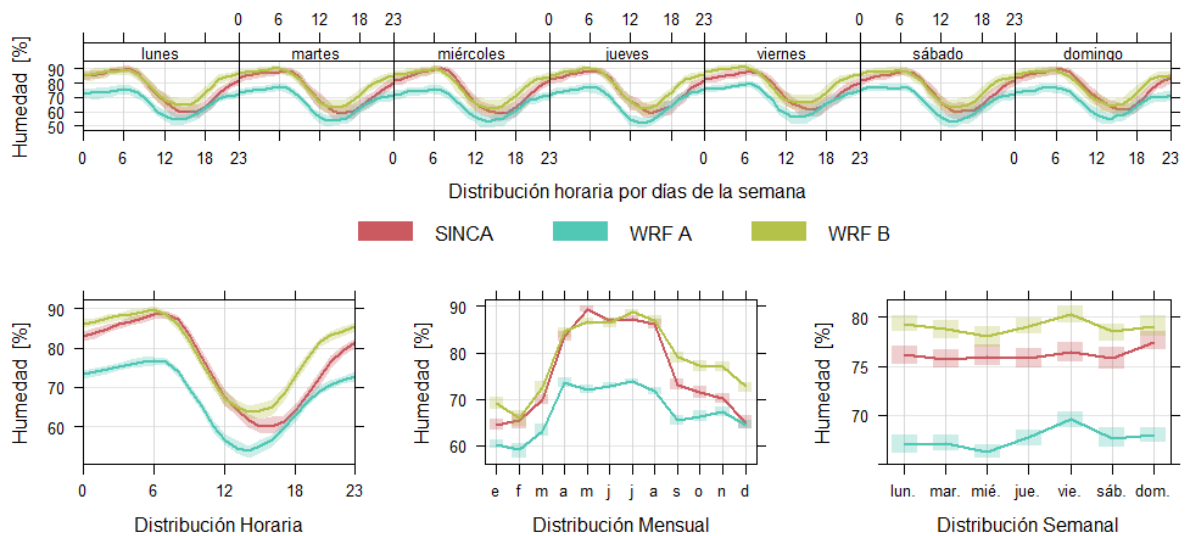


Figura A2. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la humedad relativa modelada por WRF y muestreada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el 2019.

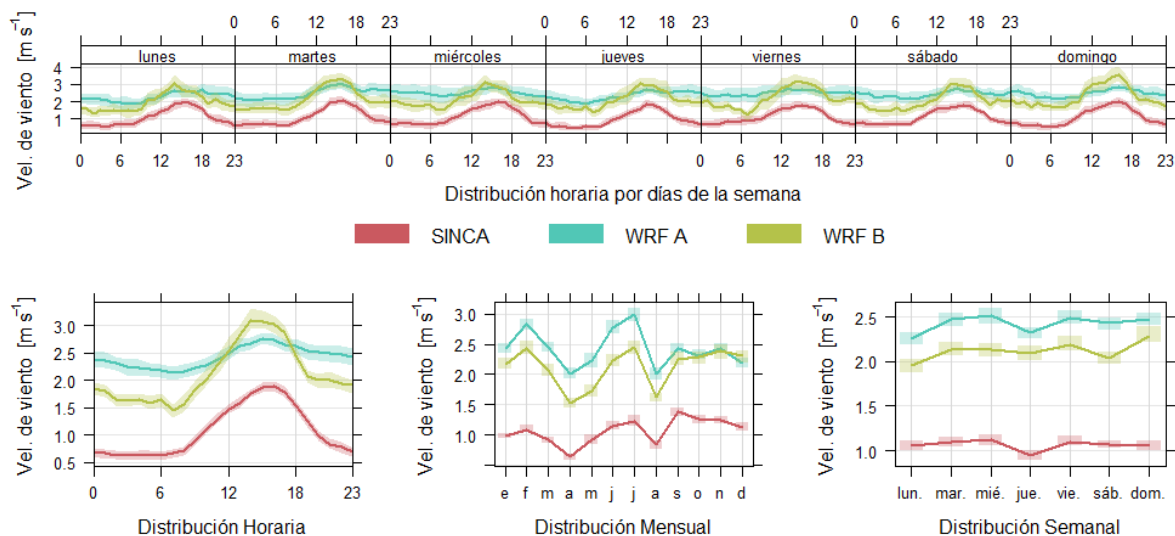


Figura A3. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la velocidad del viento modelada por WRF y muestreada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el 2019.

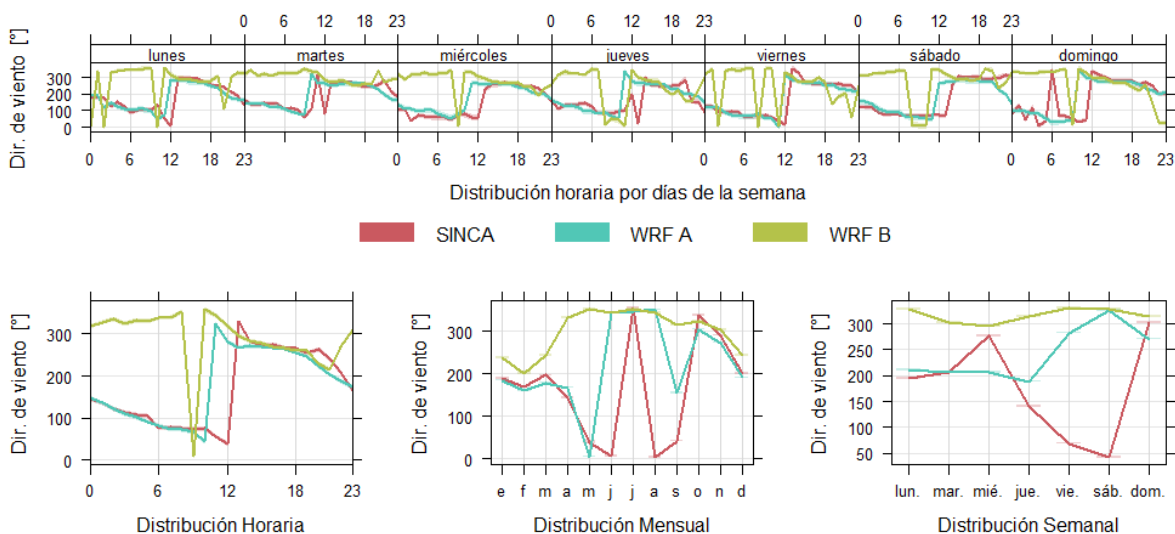


Figura A4. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la dirección del viento modelada por WRF y muestreada por la EMCA Valdivia I de la red SINCA durante el 2019.

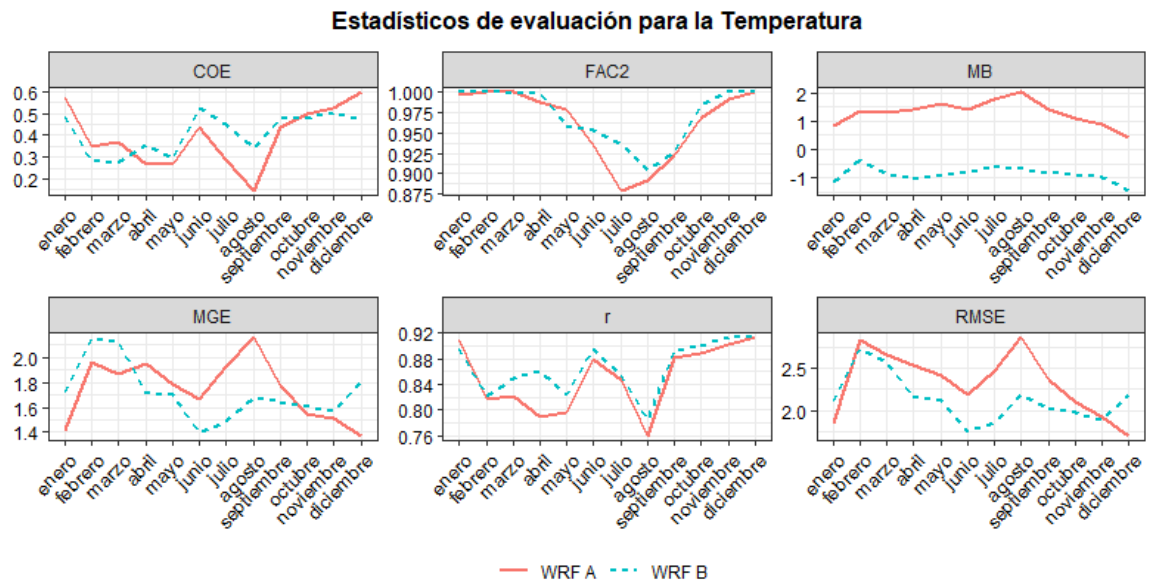


Figura A5. Series temporales de los estadísticos de evaluación de la temperatura modelada por las dos configuraciones del modelo WRF para el año 2019.

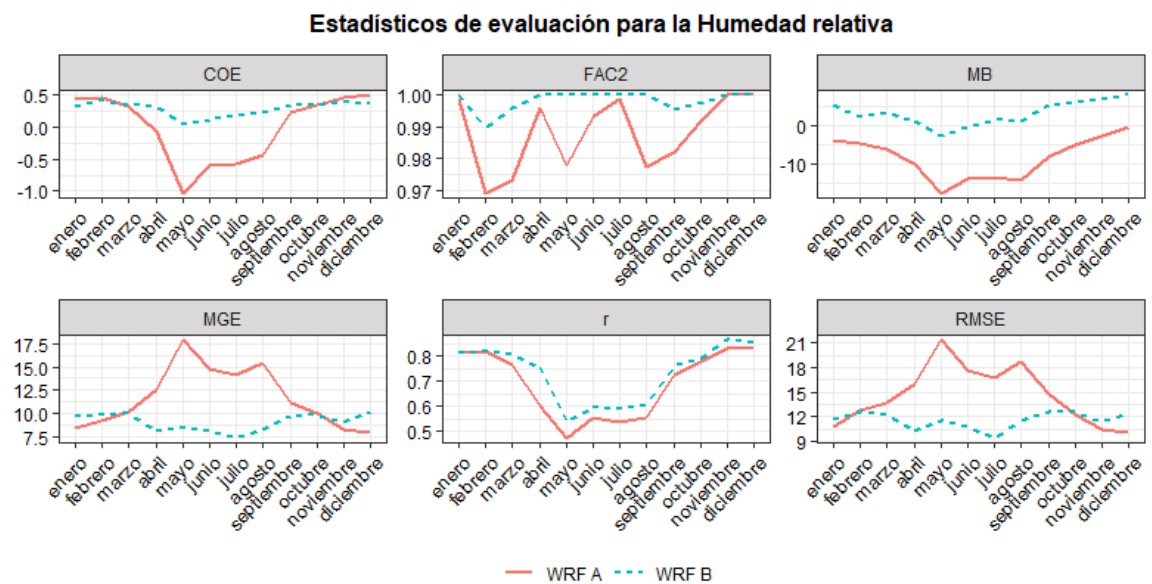


Figura A6. Series temporales de los estadísticos de evaluación de la humedad relativa modelada por las dos configuraciones del modelo WRF para el año 2019.

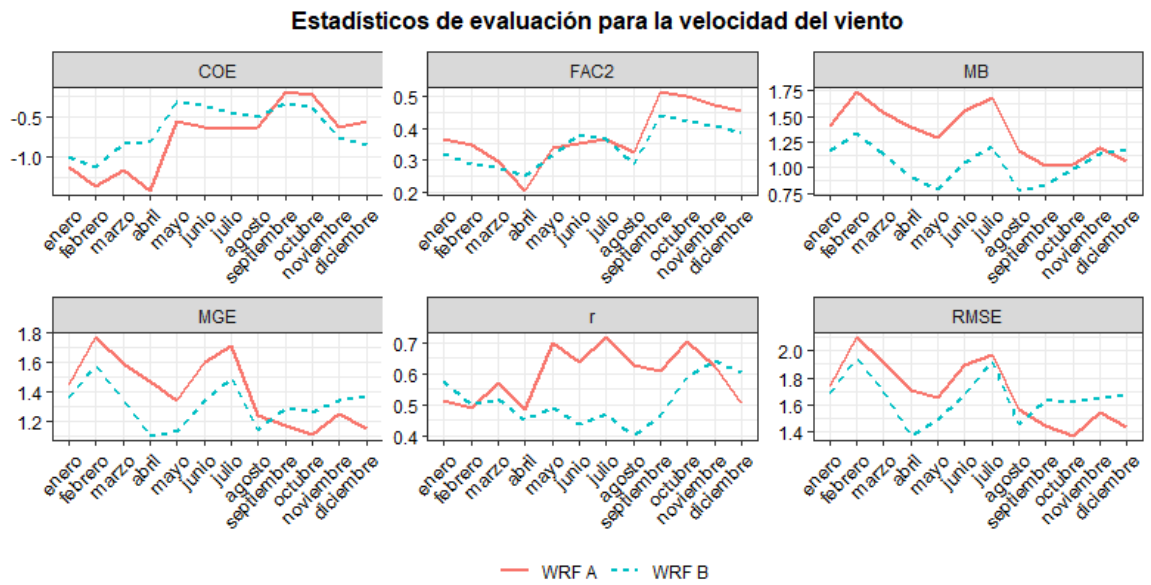
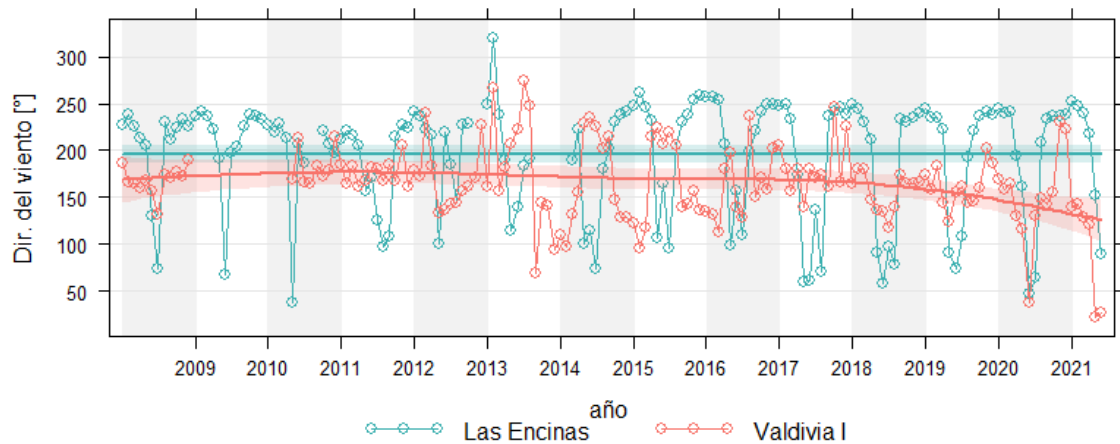


Figura . A7. Series temporales de los estadísticos de evaluación de la velocidad del viento modelada por las dos configuraciones del modelo WRF para el año 2019.



FiguraA8. Serie temporal histórica de la dirección de viento muestreada por EMCA Valdivia I y EMCA Las encinas.

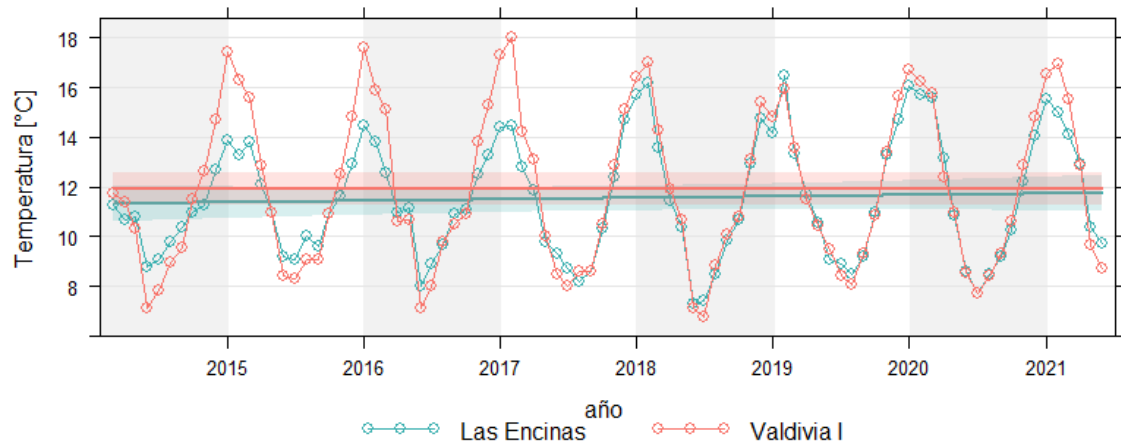


Figura . A9. Serie temporal histórica de la temperatura ambiental muestreada por EMCA Valdivia I y EMCA Las encinas.

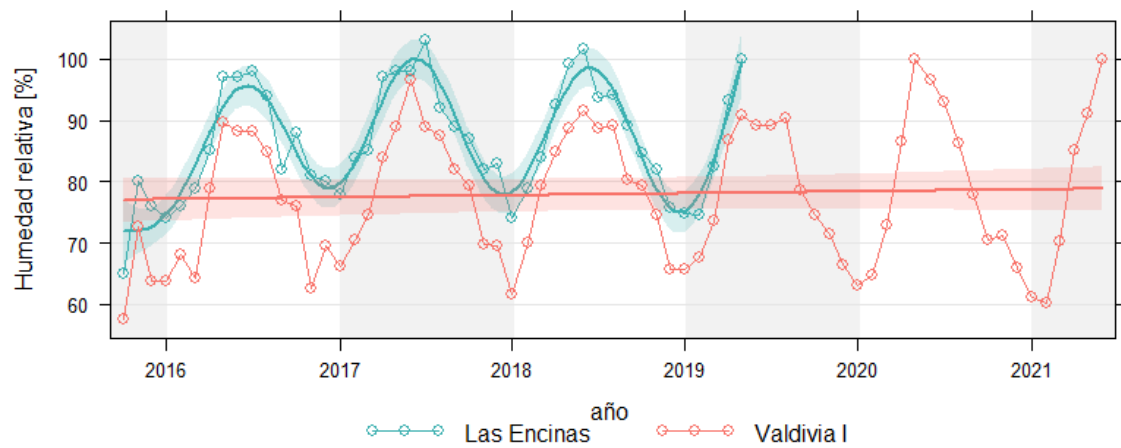


Figura . A10. Serie temporal histórica de la humedad relativa muestreada por EMCA Valdivia I y EMCA Las encinas.

Sección 7.2: Métricas cualitativas adicionales del análisis datos de referencia.

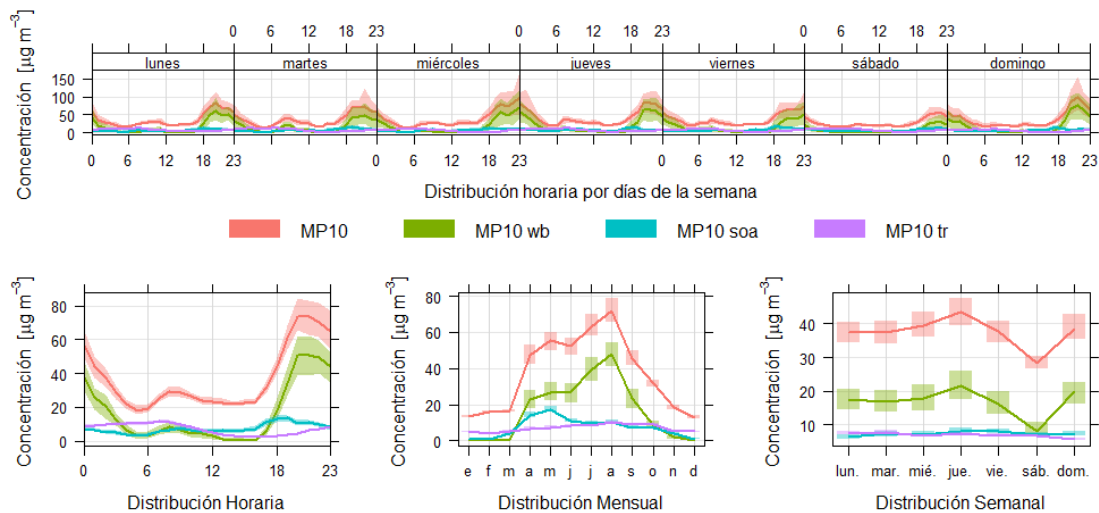


Figura. A11. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la estimación de concentración de los MP_{10} wb, MP_{10} soa y MP_{10} tr resueltos por AC junto a la concentración de $MP_{2,5}$ ambiental durante el 2019.

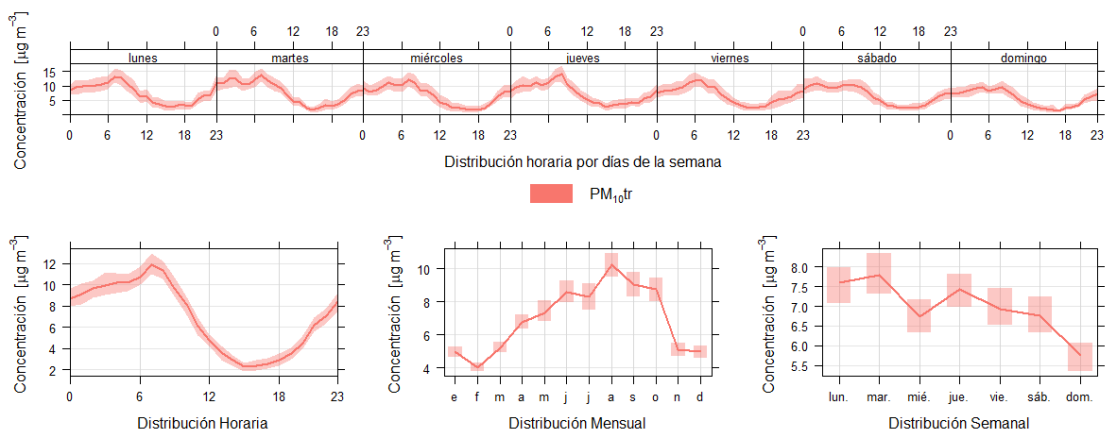


Figura . A12. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de la estimación de la concentración de MP_{10} atribuible al tráfico vehicular AC durante el 2019.

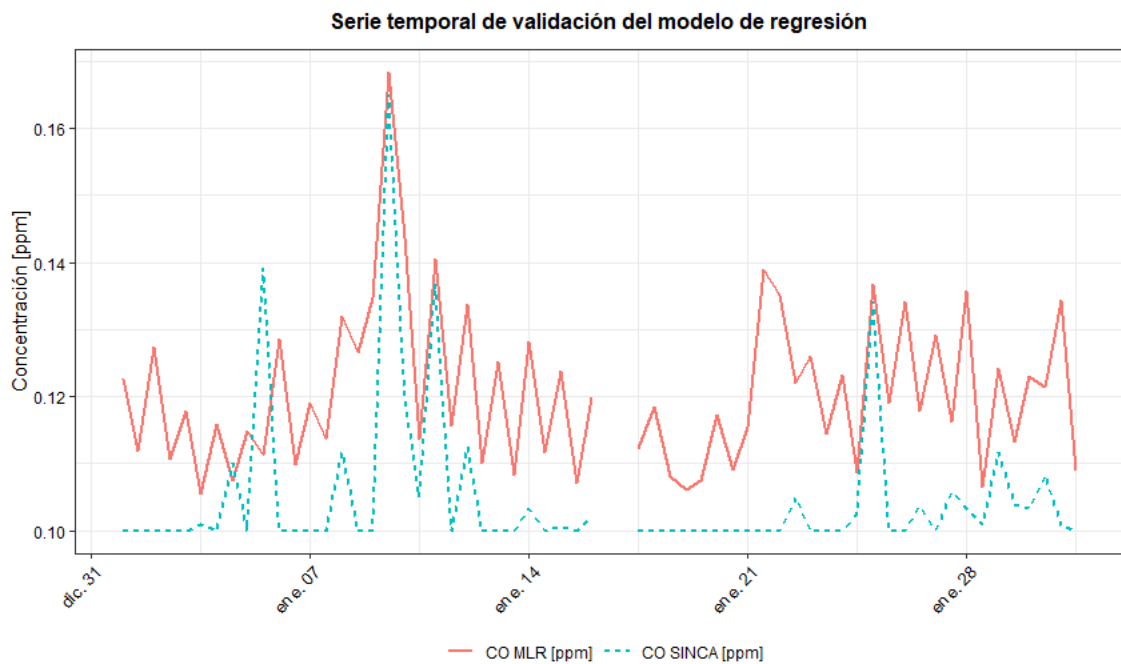


Figura A13. Serie temporal de validación de MLR de un mes aleatorio (Enero/2019) donde se muestran los niveles de monóxido de carbono ambientales medidos por la EMCA Valdivia I y los predichos por el MLR aplicado.

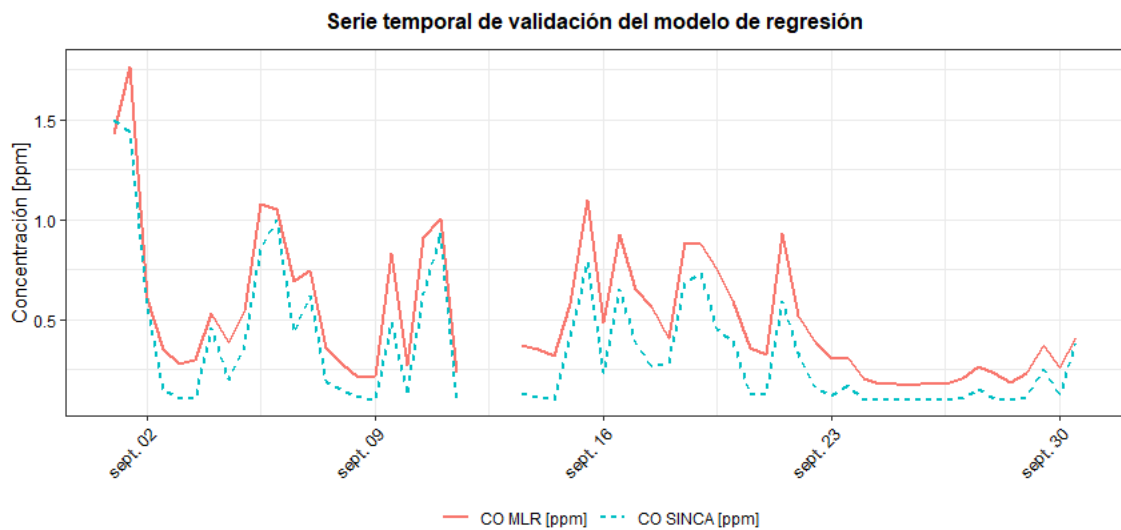


Figura A14. Serie temporal de validación de MLR de un mes aleatorio (Septiembre/2019) donde se muestran los niveles de monóxido de carbono ambientales medidos por la EMCA Valdivia I y los predichos por el MLR aplicado.

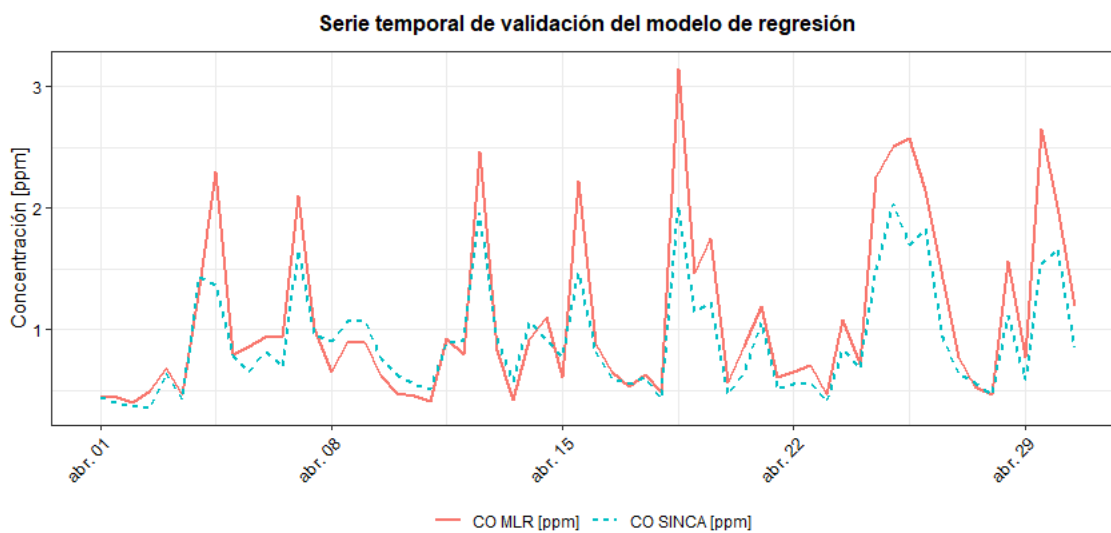


Figura A15. Serie temporal de validación de MLR de un mes aleatorio (Marzo/2019) donde se muestran los niveles de monóxido de carbono ambientales medidos por la EMCA Valdivia I y los predichos por el MLR aplicado.

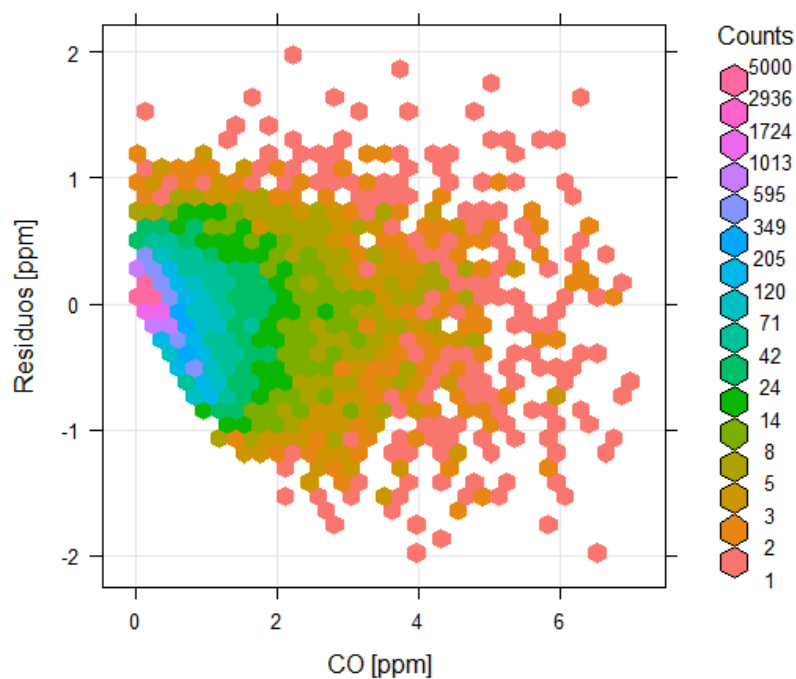


Figura A16. Diagrama de dispersión Hexbin de los residuos del modelo de regresión y la concentración ambiental de monóxido de carbono en todo el periodo modelado

Sección 7.3: Métricas cualitativas adicionales del análisis de sensibilidad de integración de fuentes

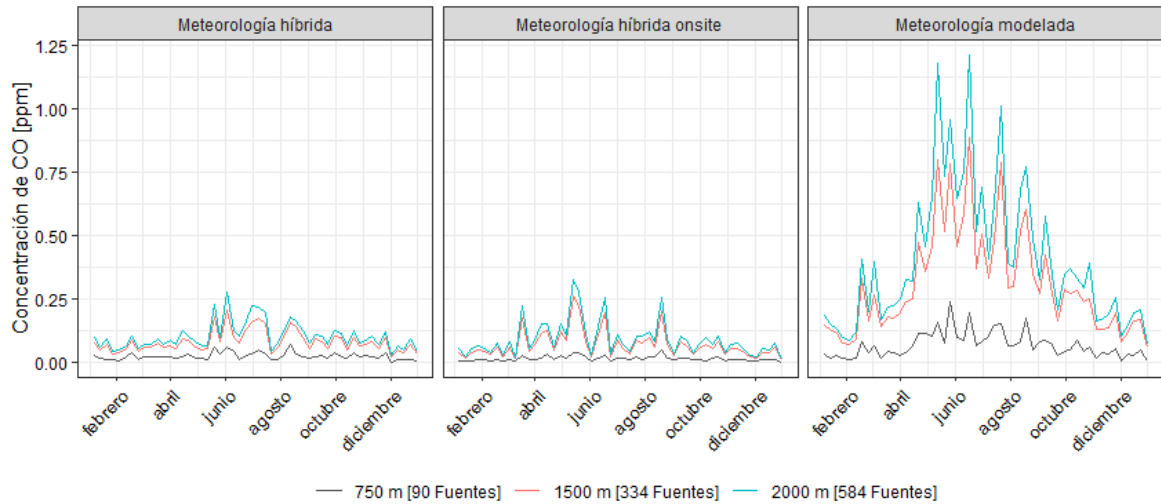


Figura A17. Series temporales de las concentraciones obtenidas en AERMOD de monóxido de carbono utilizando diversas entradas de información meteorológica y distintos radios de integración de fuentes.

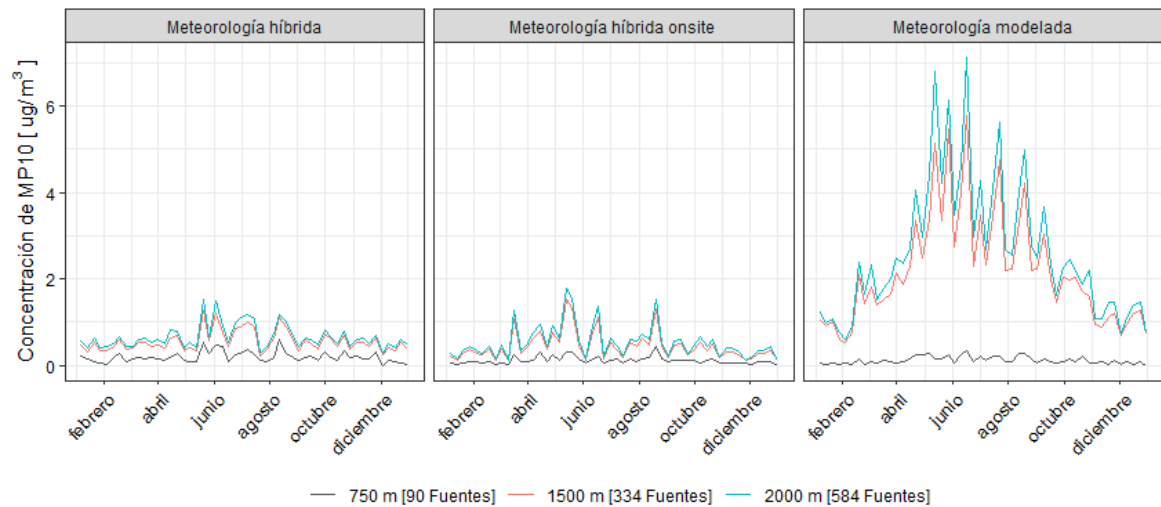


Figura A18. Series temporales de las concentraciones obtenidas en AERMOD de MP_{10} *Escape* utilizando diversas entradas de información meteorológica y distintos radios de integración de fuentes.

Sección 7.4: Estimadores y significancia de las regresiones utilizadas en MLB.

Tabla A1. Resultados de los estimadores de las regresiones lineales utilizadas en MLB.

Linea de borde	Estimador	Valor de r-pearson	P-valor
Superior	1	1	~ 0
Inferior	0,057	0,9997964	6,14E-162

Sección 7.5: Salidas de la consola del proceso de selección de variables para MLR.

Utilizando el método paso a paso descrito en la metodología basado en el uso del criterio de selección *AIC* tanto *backward* como *forward* se lograron las siguientes salidas de la consola de comandos en R, utilizando el paquete MASS y la función stepAIC.


```

1. Método Forward
2. Start: AIC=-10374.86
3. CO ~ 1
4.
5.
6.
7. + mp25wb      AIC      -51616
8. + mp25ns      -11354
9. + mp25sec     -11253
10. + mp25reg    -10716
11. + mp25soa    -10618
12. + mp25tr     -10422
13. <none>      -10375
14.
15. Step: AIC=-51615.77
16. CO ~ mp25wb
17.
18. (Inclusión de "mp25wb", la variable que en el paso anterior logró el valor de AIC
    óptimo)
19.
20.
21. + mp25soa    AIC      -53869
22. + mp25tr     -52031
23. + mp25sec    -51727
24. + mp25ns    -51706
25. + mp25reg   -51670
26. <none>      -51616
27.
28. Step: AIC=-53868.69
29. CO ~ mp25wb + mp25soa
30.
31. (Inclusión de la variable independiente "mp25soa")
32.
33.
34.
35. + mp25tr     AIC      -54342
36. + mp25ns    -53965
37. + mp25sec   -53886
38. + mp25reg   -53872
39. <none>      -53869
40.
41. Step: AIC=-54342.25
42. CO ~ mp25wb + mp25soa + mp25tr
43.
44. (Inclusión de la variable independiente "mp25tr")

```

Figura A19. Salida del análisis de selección de variables tipo *forward* para el modelo de regresión lineal múltiple de estimación del CO emitido por el tráfico.

```

45. AIC
46. + mp25ns -54450
47. + mp25sec -54347
48. + mp25reg -54344
49. <none> -54342
50.
51. Step: AIC=-54450.01
52. CO ~ mp25wb + mp25soa + mp25tr + mp25ns
53.
54. (Inclusión de la variable independiente "mp25ns")
55.
56. AIC
57. + mp25sec -54453
58. + mp25reg -54451
59. <none> -54450
60.
61. Step: AIC=-54453.14
62. CO ~ mp25wb + mp25soa + mp25tr + mp25ns + mp25sec
63.
64. (Inclusión de la variable independiente "mp25sec")
65.
66. AIC
67. + mp25reg -54457
68. <none> -54453
69.
70. (Inclusión de la variable independiente "mp25reg")
71.
72.
73. Regresión lineal múltiple óptima según el método backward basado en el
    criterio AIC:
74.
75. Step: AIC=-54456.85
76. CO ~ mp25wb + mp25soa + mp25tr + mp25ns + mp25sec + mp25reg

```

Figura A20. Salida del análisis de selección de variables tipo *Forward* para el modelo de regresión lineal múltiple de estimación del CO emitido por el tráfico (...).

```

1. Método Backward
2. Start: AIC=-54456.85
3. CO ~ mp25wb + mp25tr + mp25reg + mp25sec + mp25sec + mp25ns +
4.   mp25soa
5.
6. (Remoción de cada una de las variables a la regresión lineal múltiple para
7.   seleccionar la regresión lineal óptima en base al criterio A/C)
8.
9. <none>           AIC           -54457
10. - mp25reg        -54453
11. - mp25sec        -54451
12. - mp25ns         -54352
13. - mp25tr         -53996
14. - mp25soa        -52177
15. - mp25wb         -13367

```

Figura A21. Salida del análisis de selección de variables tipo *Backward* para el modelo de regresión lineal múltiple de estimación del CO emitido por el tráfico.

Sección 7.6: Métricas cualitativas del proceso de evaluación de AERMOD para contaminación.

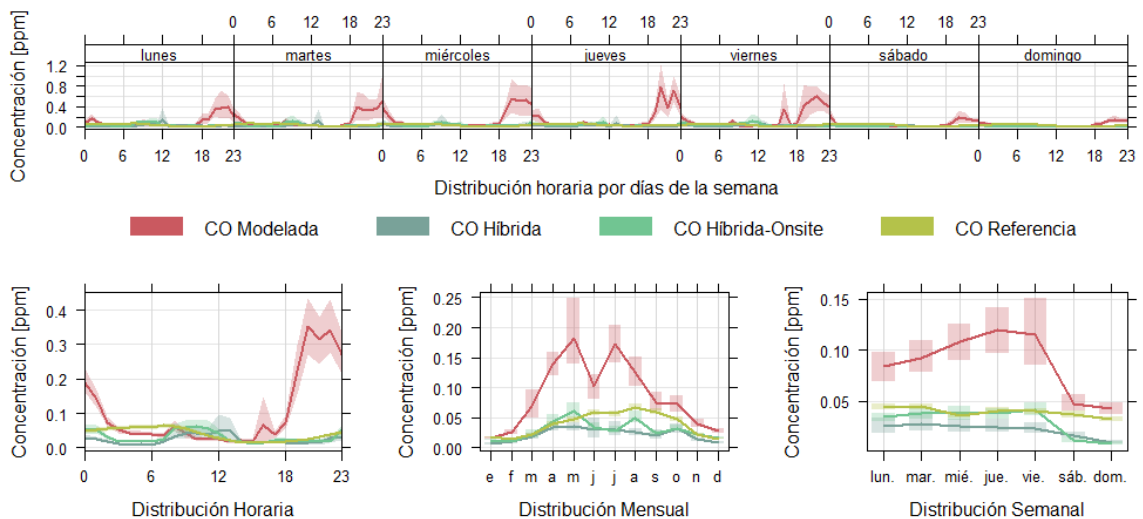


Figura . A22. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración de CO_{tr} modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019.

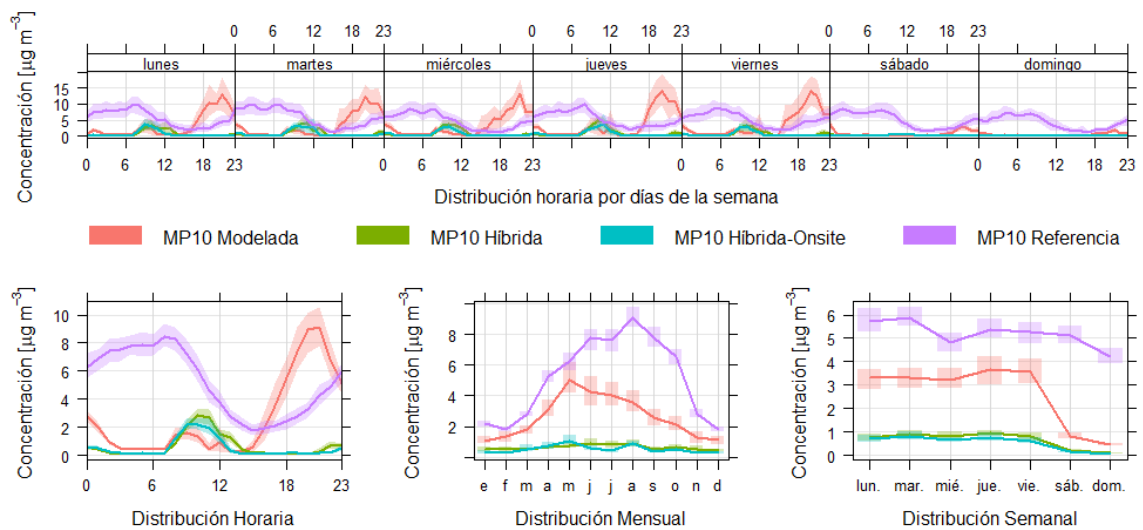


Figura A23. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración MP_{10} *Escape* modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019.

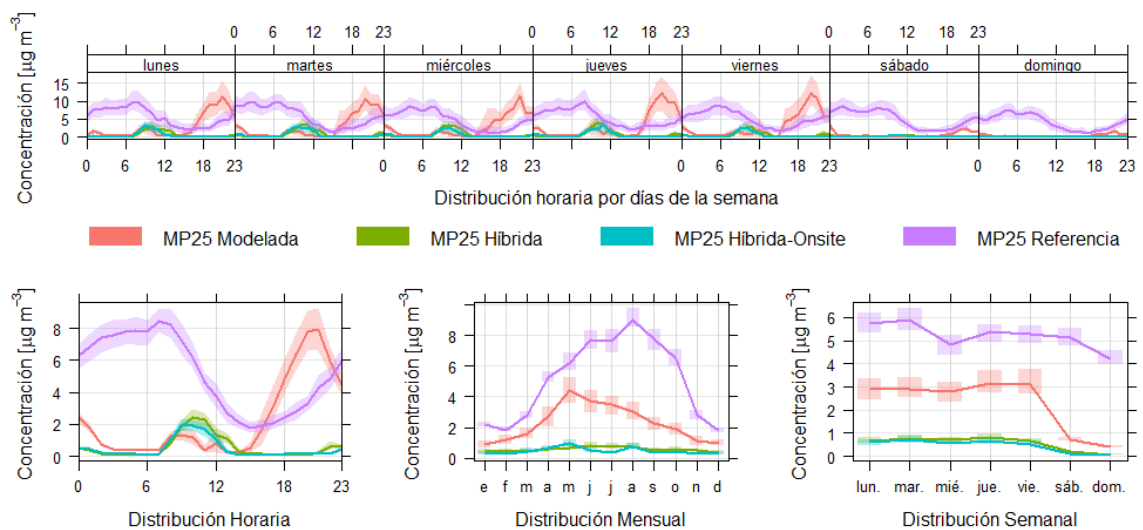


Figura A24. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración $\text{MP}_{2.5}$ *Escape* modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019.

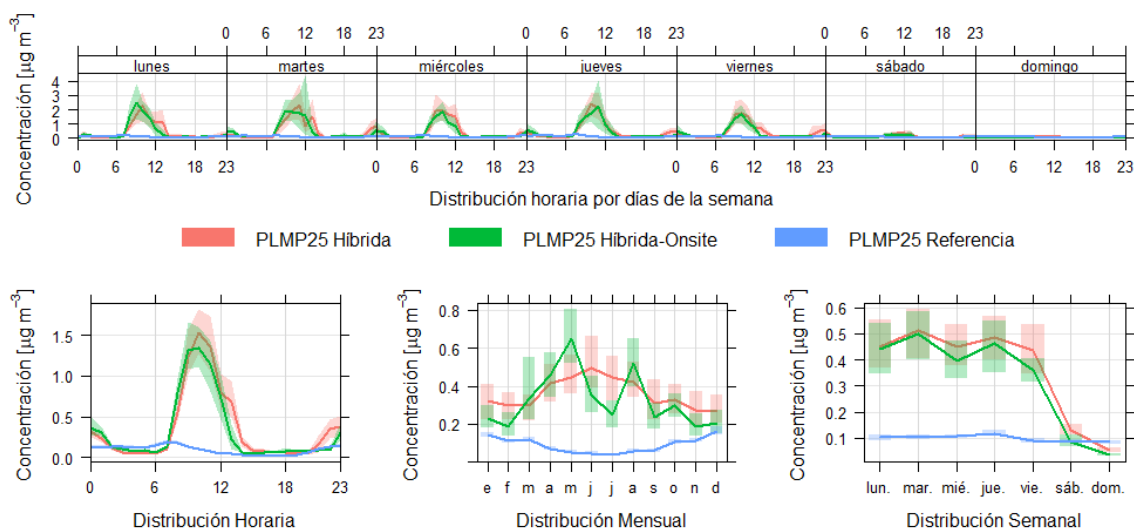


Figura A25. Variación temporal según hora, mes y día de la semana de evaluación de la concentración $MP_{2,5}$ *No-Escape* modelada por AERMOD y su concentración de referencia durante el 2019.

Sección 7.7: Material adicional de análisis.

Tabla A2. Resumen de los permisos de circulación vehicular otorgados a vehículos motorizados en tres comunas de Chile durante el 2010 y 2019 según INE, 2021.

Permisos de circulación vehículos motorizados			
Año	2010	2019	Crecimiento con respecto al año 2010
Valdivia	42.677	47.030	10,2%
Temuco	47.518	64.802	36,4%
Santiago	1.087.934	2.197.683	102,0%