

01177  
19



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MÉXICO**

**FACULTAD DE INGENIERÍA  
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO**

**ANÁLISIS DE LA PROPAGACIÓN DE ERROR A  
TRAVÉS DE TRES MODELOS GAUSSIANOS DE  
DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES  
ATMOSFÉRICOS**

**TESIS PROFESIONAL  
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:  
MAESTRO EN INGENIERÍA  
(AMBIENTAL)**

**P R E S E N T A:  
I.Q. RAMÓN CARLOS TORRES ENRÍQUEZ**

**DIRECTOR DE TESIS: M.I. HNN WELLENS**



**MÉXICO, D.F.**

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

**2002**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**Posgrado de Ingeniería**

**Análisis de la propagación de error a través de tres modelos gaussianos de dispersión de contaminantes atmosféricos**

**Tesis**

**Que para obtener el grado de  
Maestro en Ingeniería Ambiental  
Presenta**

**I.Q. Ramón Carlos Torres Enríquez**

**México, D.F.**

**2002**

Dirección General de Bibliotecas  
a añadir en formato electrónico e impresa el  
enido de mi trabajo excepcional.

NOMBRE: Ramón Carlos  
TORRES ENRÍQUEZ

FECHA: 27 Oct 2002

PA: [Signature]

## Jurado asignado:

Presidente:	Dr. Vladimir Tchijov
Vocal:	M. en I. Ann Wellens
Secretario:	Dr. Arón Jazcilevich
1 <sup>er</sup> suplente	Dra. Rina Aguirre Saldívar
2 <sup>do</sup> suplente	Dr. Alejandro Rodríguez Valdés

Tutor del tema:

M. en I. Ann Wellens

Sustentante:

I.Q. Ramón Carlos Torres Enríquez

## Agradezco

A mis padres, a mi hermano, a mi familia, por su eterno apoyo.

A mis amigos y colegas que me han acompañado durante todo el proceso.

A mi Universidad.

## Contenido

Índice de figuras	iii
Índice de tablas	iv
Glosario de términos, abreviaturas y variables	v
Resumen	xi
1. Antecedentes.....	1
1.1 Objetivo	3
2. Modelos matemáticos de dispersión atmosférica .....	5
2.1 Definición	5
2.2 Clasificación de los modelos matemáticos	6
2.3 Utilidad de los modelos	7
2.4 Ecuaciones generales de transporte atmosférico	8
2.5 Deducción del modelo gaussiano	9
2.6 Modelos gaussianos existentes	11
2.6.1 Modelo de distribución de frecuencias de la concentración	12
2.6.2 Modelo operacional de dispersión atmosférica	14
2.6.3 Modelo de fuentes industriales para periodos cortos	16
2.7 Comparación de los modelos seleccionados	18
2.7.1 Estabilidad atmosférica	21
2.7.2 Coeficientes de dispersión	21
2.7.3 Altura efectiva	23
2.7.4 Velocidad de viento a la altura efectiva	23
2.7.5 Comparación de concentración estimada	23
3. Análisis del desempeño del modelo .....	25
3.1 Error en los datos	25
3.1.1 Magnitud del error para los datos de entrada	25
3.1.2 Propagación del error	27
3.2 Fórmulas analíticas de error para los modelos	28
3.2.1 Fórmula del modelo IFDM	28
3.2.2 Fórmula del modelo OML	28
3.2.3 Fórmula del modelo ISCST3	29
3.3 Evaluación estadística	30
3.3.1 Importancia de la evaluación estadística	30
3.3.2 Índices estadísticos más empleados	31
3.3.3 Fórmulas analíticas de error para los índices estadísticos	33
4. Propagación de error.....	35
4.1 Propagación de error a través de cada término	35
4.1.1 Término concentración	35
4.1.2 Término horizontal	37
4.1.3 Término vertical	39

4.1.3.1.	IFDM	41
4.1.3.2.	OML	42
4.1.3.3.	ISCST3	45
4.2	Propagación de error a través de los diferentes modelos	47
4.2.1	Modelo IFDM	47
4.2.2	Modelo OML	50
4.2.3	Modelo ISCST3	53
4.3	Intercomparación de los modelos, con los datos Copenhagen	55
4.4	Propagación del error a través de la evaluación estadística	58
5.	Conclusiones y recomendaciones .....	63
Bibliografía .....		65
Anexo A. Tabla resumen de modelos de dispersión de contaminantes		69
Anexo B. Valores de monitoreo y generados por los modelos		71

## Índice de figuras

2.1 Modelo gaussiano.	11
2.2 Esquema de dispersión y reflexión de contaminantes modelo IFDM.	20
2.3 Esquema de dispersión de contaminantes modelos OML e ISCST3.	20
2.4 Comparación de los coeficientes de dispersión horizontal	22
2.5 Comparación de los coeficientes de dispersión vertical	22
2.6 Concentración estimada por los modelo IFDM, OML e ISCST3	24
4.1 Comportamiento del término concentración.	35
4.2 Comportamiento de la expresión $\left(\frac{1}{1 + \varepsilon_{\sigma_y}}\right)^2 - 1$	38
4.2 Contribución al error debido al término horizontal.	39
4.3 Comportamiento del término vertical.	41
4.4 Aportación del término vertical modelo IFDM con $\varepsilon_{h_e} = 15\%$ .	42
4.5 Comportamiento del término vertical modelo OML.	43
4.6 Comportamiento del término vertical para el modelo OML con $\varepsilon_L = 30\%$ $\varepsilon_{h_e} = 15\%$ .	45
4.7 Comportamiento del término vertical modelo ISCST3.	46
4.8 Error del término vertical modelo ISCST3 con $\varepsilon_{z_i} = 30\%$ $\varepsilon_{h_e} = 15\%$ .	47
4.9 Concentración estimada con y sin error modelo IFDM con $\varepsilon_{\sigma's} = 50\%$ .	48
4.10 Contribución al error debido a los términos modelo IFDM con $\varepsilon_{\sigma} = 50\%$ .	48
4.11 Concentración estimada con y sin error modelo IFDM con $\varepsilon_{\sigma's} = -50\%$ .	49
4.12 Contribución por términos al error del modelo IFDM con $\varepsilon_{\sigma} = -50\%$ .	50
4.13 Concentración estimada con y sin error modelo OML con $\varepsilon_{\sigma's} = 50\%$ .	51
4.14 Contribución al error del modelo OML debido a los diferentes términos con $\varepsilon_{\sigma} = 50\%$ .	52
4.15 Concentración estimada con y sin error modelo OML con $\varepsilon_{\sigma's} = -50\%$ .	52
4.16 Contribución al error del modelo OML debido a los diferentes términos con $\varepsilon_{\sigma} = -50\%$ .	53
4.17 Concentración estimada con y sin error modelo ISCST3 con $\varepsilon_{\sigma's} = 50\%$ .	53
4.18 Error del modelo ISCST3 debido a los términos considerando $\varepsilon_{\sigma} = 50\%$ .	54
4.19 Concentración estimada con (sin) error modelo ISC3 con $\varepsilon_{\sigma's} = -50\%$ .	54
4.20 Contribución al error del modelo ISC3 debido a los diferentes términos con $\varepsilon_{\sigma} = -50\%$ .	55
4.21 Concentración simulada por los modelos IFDM, OML e ISC3, para $\varepsilon_{\sigma_{z,y}} = 50\%$ .	56
4.22 Error propagado por los modelos IFDM, OML e ISC3, para $\varepsilon_{\sigma_{z,y}} = 50\%$ .	57
4.23 Concentración simulada por los modelos IFDM, OML e ISC3, para $\varepsilon_{\sigma_{z,y}} = -50\%$ .	57
4.24 Error propagado por los modelos IFDM, OML e ISC3, para $\varepsilon_{\sigma_{z,y}} = -50\%$ .	58



## Índice de tablas

2.1 Valores de las constantes $A, B, a$ y $b$ para las clases de estabilidad IFDM.	12
2.2 Tabla para la determinación de la estabilidad atmosférica (IFDM).	12
2.3 Formulas para determinar la elevación de la pluma (IFDM).	13
2.4 Fórmulas de la contribución convectiva del término vertical (OML).	14
2.5 Formulas de la contribución mecánica del término vertical (OML).	15
2.6 Formulas del término horizontal (OML).	15
2.7 Clases de estabilidad de Pasquill para (ISCST3).	16
2.8 Constantes para el cálculo del coeficiente de dispersión horizontal $\sigma_y$ (ISCST3).	17
2.9 Constantes para el cálculo del coeficiente de dispersión vertical $\sigma_z$ (ISCST3).	17
2.10 Tabla comparativa de los modelos seleccionados.	19
2.11 Conjunto de datos para el cálculo de las variables.	21
2.12 Valores de altura efectiva calculados.	23
2.13 Valores de velocidad a la altura efectiva.	23
2.14 Valores de concentración estimada.	24
3.1 Diferencias en el cálculo de estabilidad.	25
3.2 Errores de la velocidad de viento.	26
3.3 Errores considerados para el estudio de los modelos.	26
4.1 Casos considerados en el estudio del término horizontal.	37
4.2 Errores considerados en el estudio del término horizontal.	38
4.3 Casos de estudio del término vertical modelo IFDM.	41
4.4 Casos de estudio del término vertical modelo OML.	44
4.5 Casos de estudio del término vertical modelo ISCST3.	46
4.6 Datos meteorológicos del experimento Copenhague.	55
4.7 Concentraciones máximas calculadas.	56
4.8 Propagación de error a través del promedio.	58
4.9 Valores de sesgo calculados.	59
4.10 Valores de sesgo fraccionado calculados.	59
4.11 Valores de desviación estándar calculados.	59
4.12 Valores de desviación estándar fraccionada calculados.	59
4.13 Valores de correlación calculados.	60
4.14 Valores de error del FA2 calculados, modelo IFDM.	60
4.15 Valores de error del FA2 calculados, modelo OML.	60
4.16 Valores de error del FA2 calculados, modelo ISCST3.	61
4.17 Valores de error cuadrado medio normalizado calculados.	61

## **Glosario de términos, abreviaturas y variables**

<b>Análisis cuantitativo</b>	Determinación de la cantidad o concentración en que se encuentra una sustancia específica en una muestra.
<b>Evaluación estadística</b>	Comparación del resultado de un modelo con la observación correspondiente, mediante técnicas estadísticas.
<b>Certidumbre/incertidumbre</b>	Medida del error promedio en un conjunto de datos.
<b>Dispersión</b>	Proceso por el cual un contaminante se transporta a sitios alejados de su fuente.
<b>Emisión</b>	La descarga directa o indirecta a la atmósfera de toda sustancia, en cualquiera de sus estados físicos o de energía (LGEEPA 1988).
<b>Error absoluto</b>	Diferencia entre el valor exacto y su aproximación.
<b>Error relativo</b>	Razón del error absoluto entre el valor verdadero.
<b>Inventario de emisiones</b>	Lista de las cantidades de diferentes contaminantes antropogénicos y naturales, emitidos a la atmósfera, agua y suelo desde todas las fuentes de una cierta región en determinado periodo de tiempo.
<b>Modelo matemático de dispersión atmosférica</b>	Ecuación o conjunto de ecuaciones, generalmente basado en principios físicos, que tiene como fin el estimar la concentración de contaminantes del aire en un área, periodo de tiempo y condiciones meteorológicas específicas.
<b>Monitoreo ambiental</b>	Medida y evaluación de los agentes en el ambiente para estimar la exposición ambiental y el riesgo a la salud (NOM-048-SSA1-1993).
<b>Receptor</b>	Medio o individuo que se ve afectado por un contaminante.

## Abreviaturas

AMS	American Meteorological Society, EUA
MVK	Model Validation Kit
NERI	National Environmental Research Institute, Dinamarca
EPA	Environmental Protection Agency, EUA
EPRI	Electric Power Research Institute, EUA
VITO	Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek, Bélgica
IFDM	Immissie Frequentie Distributie Model
ISCST3	Industrial Source Complex Short Term
OML	Operational Atmospheric Dispersion Model

### Variables usadas en los modelos IFDM, OML e ISCST3

Variable	Unidades	Definición
( <i>A, B, a y b</i> )	adimensionales	Constantes del modelo IFDM
<i>B</i>	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Índice estadístico sesgo
( <i>c, d, e y f</i> )	adimensionales	Constantes del modelo ISCST3
<i>C</i>	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Concentración
<i>C<sub>p</sub></i>	$\text{Cal}/\text{g}^\circ\text{C}$	Calor específico del aire.
<i>D<sub>j</sub></i>		Coefficiente de difusión
<i>d</i>	<i>m</i>	Diametro de la chimenea
<i>FA2</i>	adimensional	Índice estadístico FA2.
<i>F<sub>b</sub></i>	$\text{m}^4/\text{s}^3$	Flujo bouyante.
<i>FB</i>	adimensional	Índice estadístico sesgo fraccionado.
<i>F<sub>m</sub></i>	$\text{m}^4/\text{s}^2$	Flujo de momento.
<i>FS</i>	adimensional	Desviación estándar fraccionada.
<i>G<sub>i</sub></i>	$\text{kgm}/\text{s}^2$	Fuerza de gravedad.
<i>g</i>	$9.80665 \text{ m}/\text{s}^2$	Aceleración de la gravedad
<i>h<sub>e</sub></i>	<i>m</i>	Altura efectiva
<i>h<sub>g</sub></i>	<i>m</i>	Altura de la chimenea.
<i>L</i>	<i>m</i>	Altura de Monin-Obukhov.
<i>M</i>	<i>MW</i>	Flujo de calor emitido.
<i>NMSE</i>	adimensional	Índice estadístico error medio cuadrático normalizado.
<i>O<sub>i</sub></i>	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Concentración <i>i</i> obtenida del monitoreo en campo.
$\bar{O}$	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Promedio de las concentraciones monitoreadas.
<i>Pr</i>	$\text{kg}/\text{cm}^2$	Presión
<i>P<sub>i</sub></i>	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Concentración <i>i</i> estimada a través de cada modelo.
$\bar{P}$	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Promedio de las estimaciones.
$\bar{O}$	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Concentración obtenida del monitoreo en campo.
<i>Q</i>	<i>g/s</i>	Flujo másico de la emisión
<i>R</i>	$\text{m}^3/\text{s}$	Flujo volumetrico.
<i>S</i>	adimensional	Coefficiente de estabilidad atmosférica.

$S_o$	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Desviación estándar, de los datos moniotreados.
$S_p$	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Desviación estándar, de las estimaciones.
$S_\Phi$		Término fuente del escalar $\Phi$
$t$	$s$	Tiempo
$T_a$	$^\circ\text{C}$	Temperatura del aire.
$T_g$	$^\circ\text{C}$	Temperatura de la emisión.
$u$	$\text{m}/\text{s}$	Velocidad en la dirección $x$
$u_i$	$\text{m}/\text{s}$	Velocidad del viento en dirección $i$
$\bar{u}$	$\text{m}/\text{s}$	Velocidad del viento promedio
$u_{h_e}$	$\text{m}/\text{s}$	Velocidad de viento a la altura efectiva
$u_{69}$	$\text{m}/\text{s}$	Velocidad del aire a 69 m.
$u_*$	$\text{m}/\text{s}$	Velocidad de fricción
$w_*$	$\text{m}/\text{s}$	Velocidad convectiva.
$w_g$	$\text{m}/\text{s}$	Velocidad de la emisión
$x$	$m$	Distancia en la trayectoria de la dispersión a partir de la fuente.
$y$	$m$	Distancia perpendicular a la trayectoria de la dispersión.
$z$	$m$	Distancia vertical
$z_i$	$m$	Altura de la capa de mezcla
$z_o$	$\text{cm}$	Longitud de rugosidad
$z_r$	$m$	Altura del receptor a partir de la fuente.
$\Delta h$	$m$	Elevación de la pluma.
$\Delta h_{init}$	$m$	Fórmula empleada por el modelo OML para determinar la elevación de la pluma. pag.15
$\Delta h_f$	$m$	Fórmula empleada por el modelo OML para determinar la elevación de la pluma. pag.15
$\frac{\partial \theta}{\partial z}$	$\text{m}/^\circ\text{C}$	Gradiente vertical de temperatura.
$\epsilon_B$	%	Error propagado a través del sesgo.
$\epsilon_{FA2}$	%	Error propagado a través del índice estadístico FA2.

$\varepsilon_{FB}$	%	Error propagado a través del sesgo fraccionado.
$\varepsilon_{FS}$	%	Error propagado a través de la desviación estándar fraccionada.
$\varepsilon_{h_e}$	%	Error de la altura efectiva.
$\varepsilon_{IFDM}$	%	Error propagado por el modelo IFDM.
$\varepsilon_{ISCST3}$	%	Error propagado por el modelo ISCST3.
$\varepsilon_{NMSE}$	%	Error propagado a través del error cuadrado medio normalizado.
$\varepsilon_{OML}$	%	Error propagado por el modelo OML.
$\varepsilon_{\bar{O}}$	%	Error propagado por el promedio de las concentraciones monitoreadas.
$\varepsilon_{O_i}$	%	Error de la concentración moniotreada $i$
$\varepsilon_{\bar{P}}$	%	Error propagado por el promedio de las concentraciones estimadas.
$\varepsilon_{P_i}$	%	Error de la estimación $i$
$\varepsilon_{\pi}$	%	Error propagado a través del coeficiente de correlación.
$\varepsilon_Q$	%	Error de la emisión
$\varepsilon_{S_o}, \varepsilon_{S_p}$	%	Error propagado a través de la desviación estándar.
$\varepsilon_{\sigma_y}, \varepsilon_{\sigma_x}$	%	Error del coeficiente de dispersión
$\varepsilon_u$	%	Error de la velocidad del viento.
$\Phi$		Variable escalar.
$\Gamma$	$-9.86E - 3^{\circ}C/m$	Gradiente térmico adiabático.
$\lambda$		Constante para determinar la estabilidad atmosférica IFDM
$\mu$	$C_p$	Viscosidad del fluido
$\rho$	$kg/m^3$	Densidad del aire
$\pi$	adimensional	Coficiente de correlación
$\sigma_y, \sigma_z$	$m$	Coficientes de dispersión horizontal y vertical.
$\sigma_{ij}$		Tensor de esfuerzos.

$\sigma_{zc}$	$m$	Coeficiente de dispersión vertical, parte convectiva.
$\sigma_{zm}$	$m$	Coeficiente de dispersión vertical, parte mecánica.
$\sigma_{yc}$	$m$	Coeficiente de dispersión horizontal, parte convectiva.
$\sigma_{ym}$	$m$	Coeficiente de dispersión horizontal, parte mecánica.

## Resumen

Los modelos matemáticos de dispersión de contaminantes son un conjunto de ecuaciones matemáticas, generalmente basadas en principios físicos y/o químicos, que tiene como fin el estimar la concentración de contaminantes en un área y periodo de tiempo específicos, dadas unas condiciones meteorológicas.

Un tipo de modelos matemáticos de dispersión de contaminantes muy empleados son los modelos gaussianos, debido a la rapidez con la que obtienen resultados; algunos son considerados como modelos regulatorios por diferentes agencias internacionales relacionadas con el control de la contaminación.

Los resultados o estimaciones obtenidos por los modelos generalmente no coinciden con los valores monitoreados, debido a que los modelos no consideran todas las variaciones que se presentan en la atmósfera. Asimismo, diferentes modelos, aún del mismo tipo, generan por lo regular resultados diferentes, debido a la forma en que se determinen las variables consideradas dentro del modelo. En este trabajo se comparan tres modelos matemáticos de tipo gaussiano (IFDM, OML e ISCST3), que presentan variaciones en su formulación matemática.

Se realizó una investigación para conocer la incertidumbre involucrada en las variables que utilizan estos modelos. Asimismo, se estudió la propagación del error de los datos de entrada a través de estos tres modelos mediante fórmulas analíticas que describen la propagación del error en cada término del modelo. Como parte complementaria, también se estudió la propagación de error a través de diferentes índices estadísticos usados para la evaluación de los modelos de dispersión atmosférica.

Utilizando los datos del experimento Copenhagen en 1978-79 (Olesen, H.R. 1994), se determinó también la aportación de error por término, evaluando las variables más sensibles y en qué grado éstas propagan el error a través del modelo y de los índices estadísticos.



## 1. Antecedentes

La dispersión de contaminantes a través de la atmósfera es la causa de impactos en extensas áreas, incluso en zonas que están a cientos o miles de kilómetros de los emisores de la contaminación. La razón de esto es que la atmósfera es un medio de dispersión eficaz para gases y partículas.

Los contaminantes del aire son sustancias que, por su composición y concentración, afectan de manera adversa la salud de humanos, animales, plantas o vida microbiana; dañan materiales o interfieren con la vida cotidiana. En todo el mundo se ha puesto énfasis en el control de las concentraciones de contaminantes atmosféricos a niveles en los cuales no se observen efectos en la salud.

La concentración de compuestos contaminantes en la atmósfera se determina a través de monitoreos y de estimaciones.

- El monitoreo identifica de forma cualitativa y cuantitativa las diferentes especies químicas contaminantes presentes en la atmósfera, empleando equipos que a veces resultan costosos en su adquisición y mantenimiento, que limita la posibilidad de disponer una extensa y permanente red de sensores, obligando a seleccionar solo algunos puntos de muestreo que se consideren representativos.
- Las estimaciones describen la distribución espacial y temporal de contaminantes emitidos de una o más fuentes, estas estimaciones se realizan normalmente utilizando modelos matemáticos de dispersión de contaminantes atmosféricos.

Los modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos son una herramienta útil para la identificación de responsabilidades en los niveles de contaminación existentes, mediante la evaluación de la interrelación emisor-receptor. Estos modelos también son una herramienta auxiliar para establecer medidas para el control de la contaminación, ayudando a fijar límites máximos permisibles de los contaminantes. Pueden ser usados para generar inventarios de emisiones atmosféricas y para evaluar medidas y estrategias de control a largo, mediano y corto plazo.

El desempeño de los modelos se determina a través de una comparación de las estimaciones contra mediciones directas. Las estimaciones obtenidas al utilizar un modelo no coinciden exactamente con mediciones directas debido a que:

- Los modelos son aproximaciones de los fenómenos atmosféricos y no es posible considerar todas las variaciones involucradas en estos fenómenos.
- Los modelos dan una estimación promedio de un episodio determinado.

## *Antecedentes*

- Los datos de entrada al modelo son estimados o medidos, lo cuál es difícil de hacer sin error.
- Las mediciones directas también contienen error debido a los métodos de muestreo y análisis empleados.

La tendencia actual de científicos y expertos se enfoca hacia el desarrollo de nuevos y más complicados modelos de contaminación atmosférica, que tomen en cuenta un mayor número de variables y emplean computadoras cada vez más rápidas.

Para asegurar la confiabilidad de los modelos matemáticos es necesario obtener datos más precisos y conocer el error inherente de las mediciones contra las que se evalúa su desempeño. Considerando que los datos de entrada a los modelos presentan errores, y que en la mayoría de los casos no han sido cuantificados, este trabajo busca conocer la magnitud de estos errores, estudiar la propagación del error a través del modelo gaussiano y conocer la influencia de este error en la determinación del desempeño del modelo.

## 1.1 Objetivo

Determinar la influencia que tiene el error de los datos de entrada del modelo gaussiano sobre los resultados de dicho modelo usando fórmulas analíticas y análisis de sensibilidad. De manera complementaria, desarrollar formulas analíticas, para predecir la propagación de error al emplear diferentes índices estadísticos para un conjunto de estimaciones y observaciones de error conocido.

Con el fin de cumplir el objetivo se fijaron las siguientes metas de trabajo:

- Hacer una búsqueda bibliográfica de los modelos gaussianos usados por agencias ambientales internacionales e institutos de investigación tecnológica.
- Hacer un búsqueda bibliográfica de los índices estadísticos más usados para evaluar el desempeño de los modelos de dispersión atmosférica.
- Seleccionar 3 modelos gaussianos de características similares entre si, para ser analizados dentro de este trabajo.
- Seleccionar el conjunto de índices estadísticos que serán analizados en este trabajo.
- Desarrollar fórmulas analíticas que predigan la propagación de error a través de cada término de los modelos gaussianos seleccionados.
- Desarrollar fórmulas analíticas que predigan la propagación de error para cada uno de los índices estadísticos seleccionados.
- Hacer un análisis de sensibilidad a los modelos gaussianos y a los índices estadísticos, a través de las fórmulas desarrolladas.

## *Antecedentes*

## **2. Modelos matemáticos de dispersión atmosférica**

En la actualidad no basta con entender las causas y los efectos de la dispersión de contaminantes ambientales en términos exclusivamente cualitativos, también se debe ser capaz de expresar el problema y su solución potencial de manera cuantitativa y con un grado aceptable de certidumbre. Para cumplir con este objetivo se emplean modelos de dispersión de contaminantes.

Existen fundamentalmente dos tipos de modelos de dispersión de contaminantes: modelos físicos y modelos matemáticos. En los modelos físicos se hacen réplicas a escala de las características observadas del sistema en estudio, por ejemplo los edificios y relieves topográficos y se insertan dentro de equipos como los túneles de viento. Los flujos de fluidos en estos experimentos se ajustan de modo que reproduzcan el sistema físico que representan. Por otro lado, en los modelos matemáticos se plantean ecuaciones para describir los principios físicos y químicos de la contaminación atmosférica.

Durante el desarrollo del trabajo se emplean modelos matemáticos de dispersión atmosférica, por lo que se definirá a continuación.

### **2.1 Definición**

En la literatura, se encuentran pocas definiciones de lo que un modelo matemático de dispersión atmosférica es y en algunos casos solo se define de manera imprecisa lo que es un modelo. A continuación se presentan cuatro definiciones encontradas.

Según la Sociedad Americana de Meteorología (AMS, 1980), un modelo matemático de dispersión atmosférica es un método cuantitativo, basado en principios físicos, para estimar la concentración de contaminantes en un área y periodo de tiempo específicos. Las concentraciones varían con respecto a la fuente, a la dispersión y a las condiciones meteorológicas y geofísicas que afectan a los contaminantes.

Montaño (2000) define de manera general a un modelo como cualquier conjunto de ecuaciones o estructuras matemáticas, completo y consistente, que es elaborado para corresponder a alguna otra entidad que puede ser física, biológica, social, psicológica o conceptual, incluso otro modelo matemático.

Irwin (1999) reporta que un modelo de dispersión provee la concentración media de contaminante, dadas unas condiciones meteorológicas específicas, y que las diferencias que se presentan al comparar las predicciones del modelo con las observaciones son el reflejo de la incertidumbre inherente debido a la turbulencia natural en la atmósfera.

Willmott (1981) plantea como objetivo de los modelos el poder predecir respuestas en espacio y tiempo dadas unas condiciones de entrada.

A partir de las definiciones anteriores se considerará dentro de este trabajo, que un *modelo matemático de dispersión atmosférica* es un conjunto de ecuaciones basado en principios físicos, que tiene como fin el estimar la concentración de contaminantes del aire en un área, periodo de tiempo y condiciones meteorológicas específicas.

## 2.2 Clasificación de los modelos matemáticos

Considerando diferentes criterios de clasificación, los modelos matemáticos se pueden clasificar según: su alcance espacial; su resolución temporal; su elaboración; y sistema de referencia, como se explica a continuación.

- Según su alcance espacial (URL9):
  - *Mesoescala*. Utilizados para el estudio de transporte y dispersión de contaminantes a grandes distancias de (100 a 1,500 km) Estos modelos utilizan datos meteorológicos históricos.
  - *Locales*. Evalúan la convección y dispersión de los contaminantes emitidos en distancias relativamente pequeñas (1 a 100 km). Dentro de los locales se definen a los intermedios y microescala.
  - *Intermedios*. Realizan predicciones de la dispersión a distancias entre 15 y 100 km de la emisión. Por su alcance requieren una descripción meteorológica lo mas aproximada posible de la zona de aplicación e incluso, para una respuesta con la suficiente anticipación, una predicción meteorológica local a corto plazo.
  - *Microescala*. Realizan predicciones a distancias de 1 a 15 km.
- Según su resolución temporal
  - *Promedio diarios*. Para periodos de tiempo de unos días a unas semanas. Pueden combinar datos históricos con predicciones meteorológicas a fin de obtener una descripción aproximada de la atmósfera en un periodo de días.
  - *Episódicos*. Estudian la dispersión en condiciones anómalas de unas horas a unos días. Requieren una descripción exhaustiva del episodio meteorológico para obtener valores de dispersión, generalmente horarios.
  - *En tiempo real*. Aplican un modelo de tipo episódico alimentado con predicciones meteorológicas a corto plazo, corregidas con datos en tiempo real. Requieren un compromiso entre la complejidad del modelo y su velocidad de predicción de dispersiones. Generalmente son modelos locales.

- Según su elaboración
  - *Modelos estadísticos.* Utilizan datos históricos de emisión, meteorología y dispersión para establecer, mediante técnicas estadísticas, la dispersión alcanzable con unas condiciones meteorológicas y de emisión. Su aplicación como modelos de largo alcance se justifica cuando se han tomado en cuenta un mínimo de datos (por ejemplo cinco años).
  - *Modelos determinísticos.* Se basan en formulaciones matemáticas para describir los procesos atmosféricos que controlan el transporte de contaminantes, como relación entre la emisiones (causa) y niveles de concentración de contaminantes en la atmósfera (efecto).

Dentro de los modelos determinísticos existen

- *Modelos de turbulencia.* Resuelven las ecuaciones diferenciales que gobiernan el movimiento de los contaminantes en la atmósfera.
  - *Modelos de caja.* Tratan la zona en estudio como un sistema cerrado en el que se mueven los contaminantes por impulso del viento.
  - *Modelos gaussianos.* Consideran que la concentración de contaminantes sigue una distribución bigaussiana perpendicular al movimiento advectivo principal.
- Según el sistema de referencia
    - *Eulerianos.* Utilizan un sistema de referencia absoluto, calculan la dispersión referida a este sistema.
    - *Lagrangianos.* Utilizan un sistemas de coordenadas para el cálculo del desplazamiento de los contaminantes

## 2.3 Utilidad de los modelos

Los modelos no son la solución final al problema de la contaminación atmosférica, pero sí son una herramienta útil que proporciona una estimación de la concentración de contaminantes atmosféricos, a partir de información meteorológica y de información sobre la emisión. Son utilizados por autoridades de diferentes países para la gestión de la calidad del aire porque permiten:

- Apoyar en el establecimiento de una legislación para el control de las emisiones de contaminantes atmosféricos, determinando flujos máximos y concentraciones de emisión permitidas.
- Evaluar estrategias de control de emisiones, antes de llevarlas a cabo.

- Seleccionar ubicaciones de futuros focos emisores, a fin de minimizar su impacto en el entorno.
- Establecer estrategias de intervención inmediata en el control de episodios de contaminación elevada; sistemas de alerta y reducción de emisiones en tiempo real.
- Identificar responsabilidades en los niveles de contaminación existentes, mediante la evaluación de la interrelación directa emisor-receptor.
- Aumentar la resolución espacial y temporal, de una red permanente de sensores automáticos, a través de datos estimados.
- Ayudar en la definición de redes óptimas de seguimiento de la contaminación atmosférica.
- En el caso de emisiones industriales, determinar la altura necesaria del ducto de emisión para no afectar a la región circundante.
- Predecir las tendencias de la contaminación.

## 2.4 Ecuaciones generales de transporte atmosférico

Los modelos de dispersión atmosférica simulan la dispersión tridimensional de los contaminantes en el aire. Su planteamiento general corresponde a la representación matemática de cada fenómeno que experimentan los contaminantes en la atmósfera, y suma las contribuciones de todos los fenómenos en una ecuación de balance para cada propiedad considerada.

El sistema de ecuaciones considera una ecuación de conservación de materia, tres ecuaciones para describir el transporte de momento, y una ecuación de conservación para cada propiedad escalar considerada.

Ecuación de continuidad (conservación de materia)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

Ecuación de transporte de momento (masa por velocidad)

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial P_r}{\partial x_i} + G_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.2)$$

donde  $\sigma_{ij}$  es el tensor de esfuerzos y es función de la viscosidad del fluido  $\mu$ . La ecuación 2.2 representa de forma tensorial las tres ecuaciones (una para cada dirección del viento  $u_1, u_2, u_3$ ) generadas al considerar un plano de referencia cartesiano.



Ecuación de balance de escalares:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial(u_j \Phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ D_j \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right] + S_\Phi \quad (2.3)$$

Un escalar es una variable con magnitud, sin dirección y sentido; puede ser temperatura, humedad, energía cinética o concentración de contaminantes.

En estas ecuaciones el primer término es el temporal, que representa la variación local del escalar en el tiempo, el segundo es el término advectivo, el tercer término es el de difusión y el último es el término fuente.

Las ecuaciones generales de transporte atmosférico corresponden a un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, lo cual hace imposible su solución analítica. El sistema se puede resolver, por un lado empleando métodos numéricos, o por otro lado haciendo suposiciones que permitan obtener un modelo simplificado con solución analítica.

El grado de complejidad que presentan los modelos matemáticos de dispersión de contaminantes está determinado por la cantidad de suposiciones consideradas durante la solución del sistema de ecuaciones. En la siguiente sección se describen brevemente las suposiciones y consideraciones del modelo gaussiano.

## 2.5 Deducción del modelo gaussiano

Las suposiciones consideradas para desarrollar el modelo gaussiano son:

- Se considera que el aire es incompresible ( $\rho = cte$ ).
- La velocidad del viento se considera unidireccional ( $u_2 = u_3 = 0$ ) y constante en el tiempo  $\left( \frac{\partial u_1}{\partial t} = 0 \right)$ .

Estas suposiciones anulan los balances de continuidad y de momento, dejando únicamente los escalares.

- La ecuación de escalares solamente se resolverá para la concentración de un contaminante ( $\Phi_i = C$ ).

En el caso particular de un contaminante atmosférico, el término fuente  $S_c$  engloba términos que describen reacción química, fuentes y sumideros. La ecuación (2.3) se puede escribir como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_1 \frac{\partial C}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ D_j \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] + S_c \quad (2.4)$$

- Se considera estado estacionario, lo cual implica que la concentración del contaminante no cambia con respecto al tiempo  $\left( \frac{\partial C}{\partial t} = 0 \right)$ .
- No hay reacciones que degraden al contaminante ( $S_c = 0$ )
- El transporte advectivo es más importante que el difusivo en la dirección del viento.

$$u_1 \frac{\partial C}{\partial x_1} \gg \frac{\partial}{\partial x_1} \left[ D_1 \frac{\partial C}{\partial x_1} \right]$$

- Los coeficientes de difusión en dirección  $y$  y  $z$  se consideran constantes en el espacio.

Las consideraciones anteriores reducen el sistema de ecuaciones generales de transporte atmosférico, el cual en coordenadas cartesianas queda de la siguiente forma

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (2.5)$$

Haciendo las transformaciones (Wark & Warner, 1990)

$$\sigma_y^2 = \frac{2D_y x}{u} \quad \text{y} \quad \sigma_z^2 = \frac{2D_z x}{u}, \quad (2.6)$$

se puede comprobar que la ecuación (2.5) tiene como solución particular la expresión del modelo gaussiano (2.7). Este modelo calcula la concentración de un contaminante en el punto  $(x, y, z)$  en donde  $x$  es la distancia desde la fuente,  $y$  es la distancia perpendicular al eje  $x$  y  $z$  la altura sobre el nivel del suelo. Para este trabajo solamente se considerará la concentración al nivel del suelo,  $z = 0$ .

$$C(x, y, 0, h_e) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \cdot \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{h_e^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (2.7)$$

En la ecuación anterior  $Q$  es la emisión en  $\left(\frac{g}{s}\right)$ ,  $u$  es la velocidad del viento en  $\left(\frac{m}{s}\right)$ ,  $h_e$  es la altura efectiva de la emisión (m), y  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  representan la dispersión horizontal y vertical respectivamente (m).

El modelo gaussiano se representa gráficamente en la figura 2.1.

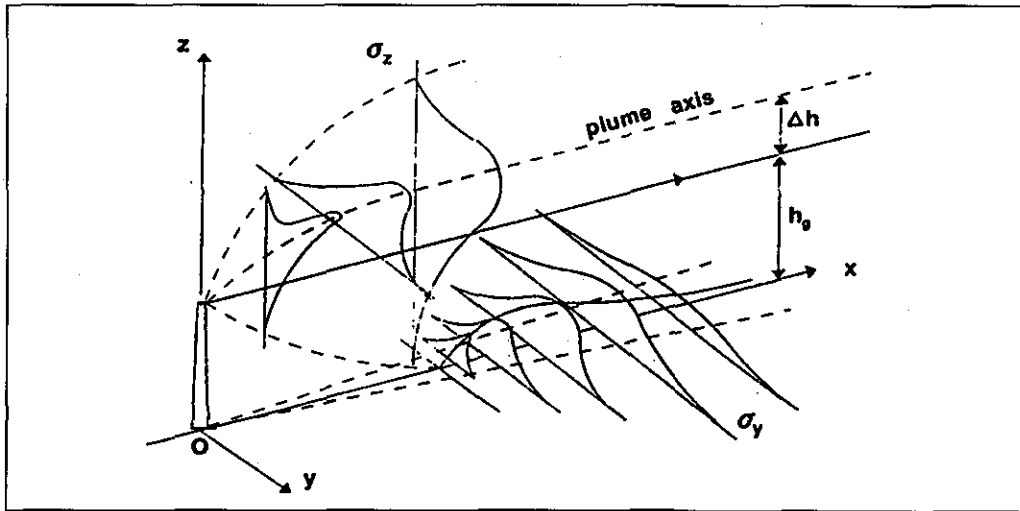


Figura 2.1 Modelo gaussiano.

En la figura 2.1  $o$  representa la base de la chimenea,  $h_g$  es la altura de la chimenea (m),  $\Delta h$  corresponde a la elevación de la pluma. Sumando ambas se obtiene la altura efectiva de la emisión  $h_e = h_g + \Delta h$ .

El modelo gaussiano, como cualquier otro modelo matemático, proporcionará solamente una estimación de la concentración atmosférica del contaminante de interés, y los resultados dependerán de la calidad de los datos de entrada utilizados, que a su vez dependen de la metodología empleadas en su determinación.

Los modelos gaussianos son los modelos mas fáciles de usar para calcular la concentración de contaminantes en un punto determinado, siendo la solución analítica mas utilizada para estimaciones rápidas de escenarios específicos.

## 2.6 Modelos gaussianos existentes

Las siguientes agencias, organizaciones e instituciones publican información relacionada con la aplicación de modelos gaussianos (URL, 1-8).

Environmental Expert Software House  
 European Environment Agency  
 Institute for Climate Research  
 Laboratory of Heat Transfer and Environmental Engineering  
 The UK National Air Quality Information Archive  
 The European Topic Centre on Air Quality  
 United States Environmental Protection Agency  
 Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek

Se encontraron 51 diferentes modelos gaussianos (*Anexo A*), de los que se seleccionaron tres después de haber solicitado a los autores información sobre las expresiones matemáticas de sus modelos. Los modelos seleccionados son IFDM, OML e ISCST3. a continuación se hace una descripción de los modelos seleccionados.

### 2.6.1 Modelo de distribución de frecuencias de la concentración

El modelo de distribución de frecuencias de la concentración (IFDM-Immissie Frequentie Distributie Model) es un modelo desarrollado por el instituto belga Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek (*VITO*, 1993), que tiene la expresión (2.7).

Este modelo considera las fórmulas 2.8 de Bultynck-Malet (1972) para calcular los coeficientes de dispersión.

$$\begin{aligned}\sigma_y &= A \cdot x^a \\ \sigma_z &= B \cdot x^b\end{aligned}\tag{2.8}$$

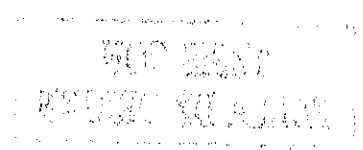
La tabla 2.1 determina las constantes  $A, B, a$  y  $b$  para las diferentes clases de estabilidad.

Tabla 2.1 Valores de las constantes  $A, B, a$  y  $b$  para las clases de estabilidad IFDM.

	A	a	B	b
E1	0.235	0.796	0.311	0.711
E2	0.297	0.796	0.382	0.711
E3	0.418	0.796	0.520	0.711
E4	0.586	0.796	0.700	0.711
E5	0.826	0.796	0.950	0.711
E6	0.946	0.796	1.321	0.711
E7	1.043	0.698	0.819	0.669

Con la tabla 2.2 se determina la clase de estabilidad

Tabla 2.2 Tabla para la determinación de la estabilidad atmosférica (IFDM).



Tipo de estabilidad	Clases	$S > 0$	$S < 0$
Muy estable	E1	$\lambda \geq 2.75$	
Estable	E2	$2.75 > \lambda \geq 1.75$	
Neutral	E3	$1.75 \geq \lambda$	$\lambda \leq 2$
Poco inestable	E4		$2 < \lambda < 2.75$
Inestable	E5		$2.75 \leq \lambda < 3.3$
Muy inestable	E6		$3.3 \leq \lambda$
Velocidad de viento alto	E7	$u_{69} \geq 11.5 \frac{m}{s}$	

Que esta dada en función del coeficiente de estabilidad atmosférica  $S$  (Seinfeld, 1986) fórmula 2.9, que es función directa del gradiente térmico de temperatura

$$S = \frac{\frac{\partial \theta}{\partial z}}{u_{69}^2} \quad (2.9)$$

y de  $\lambda$  que se define como:

$$\lambda = \log_{10} [S \cdot 10^6] \quad (2.10)$$

Para calcular la elevación de la pluma se utilizan las fórmulas de Briggs (1971), que dependen de la estabilidad atmosférica según la tabla 2.3

Tabla 2.3 Formulas para determinar la elevación de la pluma (IFDM).

Estabilidad atmosférica	Flujo de calor emitido $M$	
	Mayor de 6MW	Menor de 6MW
Inestable (E4, E5 y E6)	$\Delta h = \frac{146 \cdot M^{\frac{3}{5}}}{u_{hc}}$	$\Delta h = \frac{112 \cdot M^{\frac{3}{4}}}{u_{hc}}$
Neutra (E3 y E7)	$\Delta h = \frac{102 \cdot M^{\frac{3}{5}}}{u_{hc}}$	$\Delta h = \frac{78.4 \cdot M^{\frac{3}{4}}}{u_{hc}}$
Estable (E1)	$\Delta h = 74.4 \cdot \left( \frac{M}{u_{hc}} \right)^{\frac{1}{3}}$	
Estable (E2)	$\Delta h = 85.2 \cdot \left( \frac{M}{u_{hc}} \right)^{\frac{1}{3}}$	

Y del flujo de calor emitido  $M$  que se calcula con.

$$M = 1.36 \cdot 10^{-3} \cdot R(T_g - 283) \quad (2.11)$$

### 2.6.2 Modelo operacional de dispersión atmosférica

El modelo operacional de dispersión atmosférica (OML Operational Atmospheric Dispersion Model) es un modelo desarrollado por el laboratorio de contaminación atmosférica del *National Environmental Research Institute de Dinamarca* (NERI, 1999), que tiene la siguiente expresión.

$$C(x, y, 0; h_e) = \frac{Q}{2\pi u_{h_e} \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{h_e^2}{2\sigma_z^2}\right) + \sum_{i=1}^{\infty} \left( \exp\left(-\frac{(2iL - h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(2iL + h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right) \right\} \quad (2.12)$$

Este modelo considera las fórmulas de Deardorff (1972, 1976) y Berkowicz (1986) para calcular los coeficientes de dispersión. Estas fórmulas consideran contribuciones convectivas y mecánicas:

$$\begin{aligned} \sigma_z^2 &= \sigma_{zc}^2 + \sigma_{zm}^2 \\ \sigma_y^2 &= \sigma_{yc}^2 + \sigma_{ym}^2 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Para calcular los coeficientes de dispersión es necesario determinar la velocidad convectiva ecuación 2.14 y conocer la altura de la capa de mezcla.

$$w_* = \left( \frac{g}{T_a \rho C_p} M z_i \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.14)$$

La contribución convectiva del término vertical se calcula según la tabla 2.4.

Tabla 2.4 Fórmulas de la contribución convectiva del término vertical (OML).

$h_e \geq 0.1z_i$	$h_e < 0.1z_i$	
$\sigma_{zc}^2 = 0.33w_*^2 t^2$	$\sigma_{zc}^2 = 1.54w_*^2 \left(\frac{h_e}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}} t^2$	cuando $\sigma_{zc} < h_e$

	$\sigma_{zc}^2 = \left( 0.83w_*z_i^{-1}t + 0.33h_e^{\frac{2}{3}} \right)^3$	cuando $h_e \leq \sigma_{zc} < 0.1z_i$
	$\sigma_{zc}^2 = \left( 0.581w_*t + 0.231h_e^{\frac{2}{3}}z_i^{\frac{1}{3}} - 0.05z_i \right)^2$	cuando $\sigma_{zc} \geq 0.1z_i$

en donde  $t = x/u$

La contribución mecánica del término vertical se calcula según la tabla 2.5, en función de la velocidad de fricción  $u_*$ , que se define como:

$$\frac{u}{u_*} = \frac{1}{0.4} \ln \frac{x}{z_o} \quad (2.15)$$

Tabla 2.5 Formulas de la contribución mecánica del término vertical (OML).

$\sigma_{zm}^2 = 1.2u_*^2t^2 \exp^{-\frac{0.6tu_*}{h_e}}$	cuando $\frac{tu_*}{h_e} < 1$
$\sigma_{zm}^2 = 1.2u_*^2t^2 \exp^{-0.6}$	cuando $\frac{tu_*}{h_e} \geq 1$

El coeficiente de dispersión horizontal se calcula según la tabla 2.6

Tabla 2.6 Formulas del término horizontal (OML).

Contribución convectiva	$\sigma_{yc} = \frac{0.5w_* \frac{x}{\bar{u}}}{\sqrt{1 + 0.9 \frac{xw_*}{z_i \bar{u}}}}$
Contribución mecánica	$\sigma_{ym} = \frac{u_*}{\bar{u}} x$

La elevación de la pluma se calcula como  $\Delta h = \min(\Delta h_{mit}, \Delta h_f)$ , empleando las fórmulas 2.15 de Briggs (1984)

$$\Delta h_{init} = \left[ \frac{3}{\left(0.4 + 1.2 \frac{u}{w_g}\right)^2} \frac{F_m}{u^2} x + 1.6^3 \frac{F_b}{u^3} x^2 \right]^{\frac{1}{3}} \quad \Delta h_f = 1.3 \left(0.4 + \frac{1.2u}{w_g}\right)^{-\frac{6}{7}} \left(\frac{F_m}{u}\right)^{\frac{3}{7}} M^{-\frac{1}{7}} \quad (2.16)$$

Donde  $F_b$  y  $F_m$ , corresponden al flujo buyante y de momento, con las fórmulas 2.17

$$F_b = gw_g d^2 \left(\frac{\Delta T}{4T_g}\right) \quad F_m = w_g^2 d^2 \left(\frac{T_a}{4T_g}\right) \quad (2.17)$$

### 2.6.3 Modelo de fuentes industriales para periodos cortos

El modelo de fuentes industriales para periodos cortos (ISCST3 Industrial Source Complex Short Term) es un modelo que desarrolló *Pacific Environmental Services, Inc., Research Triangle Park, North Carolina*, para la EPA (1995), que tiene la siguiente expresión:

$$C(x, y, 0; h_e) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-0.5\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \left\{ \exp\left[-0.5\left(\frac{z_r - h_e}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-0.5\left(\frac{z_r + h_e}{\sigma_z}\right)^2\right] + \sum_{i=1}^{\infty} \left\{ \exp\left[-0.5\left(\frac{z_r - (2iz_i - h_e)}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-0.5\left(\frac{z_r + (2iz_i - h_e)}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-0.5\left(\frac{z_r - (2iz_i + h_e)}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-0.5\left(\frac{z_r + (2iz_i + h_e)}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\} \right\} \quad (2.18)$$

La clase de estabilidad del modelo ISCST3 se determina con la tabla 2.7 que relaciona el valor del gradiente térmico con las diferentes clases de estabilidad.

Tabla 2.7 Clases de estabilidad de Pasquill para (ISCST3).

Clase de estabilidad Pasquill	Descripción	$\frac{\partial \theta}{\partial z} \left[ \frac{^{\circ}C}{100m} \right]$
A	Extremadamente inestable	< -1.9
B	Inestable	-1.9 a -1.7



C	Ligeramente inestable	-1.7 a -1.5
D	Neutro	-1.5 a -0.5
E	Ligeramente estable	-0.5 a 4
F	Estable	> 4

Este modelo considerará las formulas 2.19 de Pasquill-Gifford-Turner (1970) para calcular los coeficientes de dispersión,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$ .

$$\sigma_y = 465.11628(x)\tan(0.017453293 [c - d \ln(x)])$$

$$\sigma_z = ex^f \tag{2.19}$$

Los valores de  $c, d, e$  y  $f$  están dados en función de la clase de estabilidad, para cada distancia  $x$  en kilómetros, los valores se muestran en las tablas 2.8 y 2.9

Tabla 2.8 Constantes para el cálculo del coeficiente de dispersión horizontal  $\sigma_y$  (ISCST3).

Clase de estabilidad	c	d
A	24.1670	2.5334
B	18.3330	1.8096
C	12.5000	1.0857
D	8.3330	0.72382
E	6.2500	0.54287
F	4.1667	0.36191

Tabla 2.9 Constantes para el cálculo del coeficiente de dispersión vertical  $\sigma_z$  (ISCST3).

Clase de estabilidad	x (km)	e	f
A*	< 0.10	122.800	0.94470
	0.10 - 0.15	158.080	1.05420
	0.16 - 0.20	170.220	1.09320
	0.21 - 0.25	179.520	1.12620
	0.26 - 0.30	217.410	1.26440
	0.31 - 0.40	258.890	1.40940
	0.41 - 0.50	346.750	1.72830
	0.51 - 3.11	453.850	2.11660
	> 3.11	5000*	5000*
B*	< 0.20	90.673	0.93198
	0.21 - 0.40	98.483	0.98332
	> 0.40	109.300	1.09710
C*	todas	61.141	0.91465
D	< 0.30	34.459	0.86974
	0.31 - 1.00	32.093	0.81066
	1.01 - 3.00	32.093	0.64403
	3.01 - 10.00	33.504	0.60486

	10.01 – 30.00	36.650	0.56589
	> 30.00	44.053	0.51179
E	< 0.10	24.260	0.83660
	0.10 – 0.30	23.331	0.81956
	0.31 – 1.00	21.628	0.75660
	1.01 – 2.00	21.628	0.63077
	2.01 – 4.00	22.534	0.57154
	4.01 – 10.00	24.703	0.50527
	10.01 – 20.00	26.970	0.46713
	20.01 – 40.00	35.420	0.37615
	> 40.00	47.618	0.29592
F	< 0.20	15.209	0.81558
	0.21 – 0.70	14.457	0.78407
	0.71 – 1.00	13.953	0.68465
	1.01 – 2.00	13.953	0.63227
	2.01 – 3.00	14.823	0.54503
	3.01 – 7.00	16.187	0.46490
	7.01 – 15.00	17.836	0.41507
	15.01 – 30.00	22.651	0.32681
	30.01 – 60.00	27.074	0.27436
	> 60.00	34.219	0.21716

\* si el valor calculado de  $\sigma_z$  excede 5000 m,  $\sigma_z$  se fijara como 5000 m.

La elevación de la pluma se calcula con las ecuación 2.20 (Briggs,1975), considerando flujos bouyantes y de momento (ecuación 2.17).

$$\begin{array}{ll}
 \text{Para } F_b < 55 & \text{Para } F_b \geq 55 \\
 h_e = h_s + 21.425 \frac{F_b^{\frac{3}{4}}}{w_g} & h_e = h_s + 38.71 \frac{F_b^{\frac{3}{5}}}{w_g} \quad (2.20)
 \end{array}$$

## 2.7 Comparación de los modelos seleccionados

Para el análisis de los modelos, se consideran tres que estos están formados por tres términos que son: término concentración, término horizontal y término vertical. Los modelos seleccionados son iguales en sus dos primeros términos, no así en el término vertical, presentando grandes diferencias en los resultados que generan.

$$C(x, y, 0; h_e) = \underbrace{\frac{Q}{2 \cdot u_{h_e} \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z \cdot \pi}}_{\text{Término concentración}} \cdot \underbrace{\exp\left(-\frac{y^2}{2 \cdot \sigma_y^2}\right)}_{\text{Término horizontal}} \cdot \underbrace{\exp\left(-\frac{h_e^2}{2 \cdot \sigma_z^2}\right)}_{\text{Término vertical}} \quad (2.7)$$

La tabla 2.10 resume las diferencias al calcular las variables para cada modelo, como estabilidad atmosférica, coeficientes de dispersión, elevación de la pluma y velocidad del viento

Tabla 2.10 Tabla comparativa de los modelos seleccionados.

	IFDM	OML	ISCST3
Estabilidad atmosférica	Bultynck & Malet, 1972 (E1,...,E7)	No la calcula	Pasquill (A,...,F)
Coeficientes de dispersión	Bultynck & Malet, 1972	Deardorff (1972,1976) Berkowicz (1986)	Pasquill & Gifford, 1970
Elevación de pluma	Briggs, 1971	Briggs, 1984	Briggs, 1975
Velocidad del viento	Bultynck & Malet, 1972	Expresión de potencia	Expresión de potencia
Término vertical	Considera: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>h_e, \sigma_z</math></li> <li>• Reflexión en la superficie</li> </ul>	Considera: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>h_e, \sigma_z, L</math></li> <li>• Reflexión en la superficie y en la altura de Monin-Obukhov</li> </ul>	Considera: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>h_e, z_r, \sigma_z, z_i</math></li> <li>• Reflexión en la superficie y en la altura de capa de mezcla</li> </ul>

Existen dos diferencias fundamentales entre los modelos gaussianos seleccionados:

La primer diferencia se presenta en las expresiones del término vertical de cada modelo. La expresión mas sencilla es la del modelo IFDM, que considera la dispersión de contaminantes, con reflexión en la superficie del terreno, mientras que los modelos OML e ISCST3 consideran la dispersión con reflexión de contaminantes tanto en la superficie del terreno como en la capa de mezcla. Estos modelos emplean un juego de fuentes imaginarias para calcular los efectos de reflexión (figuras 2.2 y 2.3).

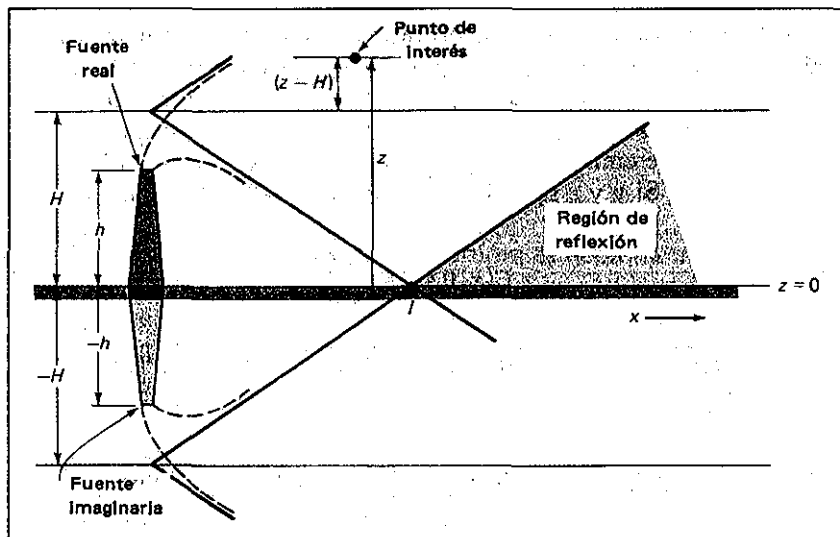


Figura 2.2 Esquema de dispersión y reflexión de contaminantes modelo IFDM.

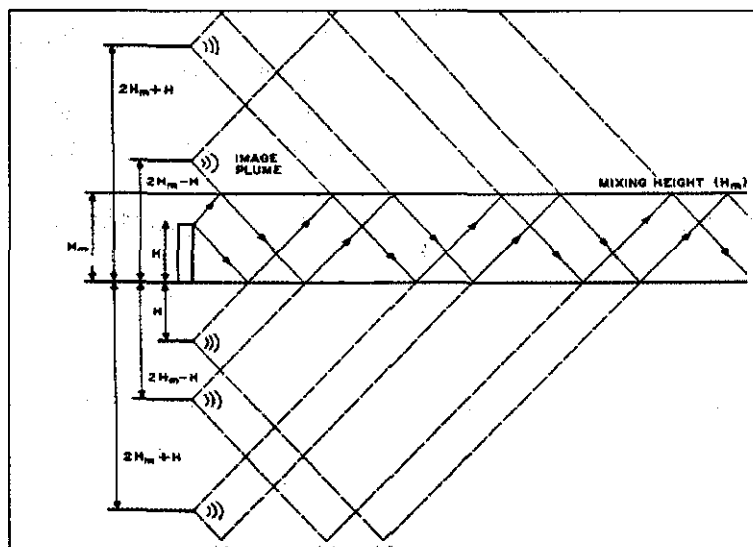


Figura 2.3 Esquema de dispersión de contaminantes modelos OML e ISCST3.

La segunda diferencia se presenta al determinar la estabilidad atmosférica, los coeficientes de dispersión, la elevación de la pluma y la velocidad del viento, por ejemplo Mientras que el modelo IFDM determina estas variables en función de estabilidad atmosférica, el modelo OML que corresponde a un modelo de segunda generación, calcula los coeficientes de dispersión, altura efectiva y velocidad de viento, sin determinar ninguna clase de estabilidad.

Para analizar las diferencias en variables calculadas por los modelos, considerando un conjunto de valores típicos (tabla 2.11), se comparó la estabilidad atmosférica, los

coeficientes de dispersión, la elevación de la pluma, la velocidad del viento y la concentración, calculados por cada modelo.

Tabla 2.11 Conjunto de datos para el cálculo de las variables.

Variable	Unidades	Valor
$T_a$	°C	20
$T_g$	°C	30
$z_i$	m	115
$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	0.038
$C_p$	cal/g°C	
$Q$	g/s	3
$h_g$	m	10
$u_{h_c}$	m/s	1.5

A continuación se muestran los valores de estabilidad atmosférica, coeficientes de dispersión, altura efectiva y velocidad de viento obtenidos.

### 2.7.1 Estabilidad atmosférica

Aunque no es una variable utilizada directamente en la expresión del modelo gaussiano (ecuaciones 2.7, 2.12 y 2.18), se usa para calcular los coeficientes de dispersión horizontal y vertical.

- El modelo IFDM empleando la tabla 2.2 y las ecuaciones 2.9 y 2.10 calcula una clase de estabilidad E1.
- El modelo OML no calcula una estabilidad atmosférica.
- La clase de estabilidad atmosférica calculada con el modelo ISCST3 es la E, utilizando la tabla 2.7.

### 2.7.2 Coeficientes de dispersión

Para los tres modelos gaussianos analizados, los coeficientes de dispersión se calcularon en función de la distancia, con las ecuaciones 2.8 y 2.19, junto con las tablas 2.4 y 2.5.

A continuación se muestran (figuras 2.4 y 2.5) los coeficientes de dispersiones horizontales y verticales calculados, para los modelos, al emplear los datos de la tabla 2.11.

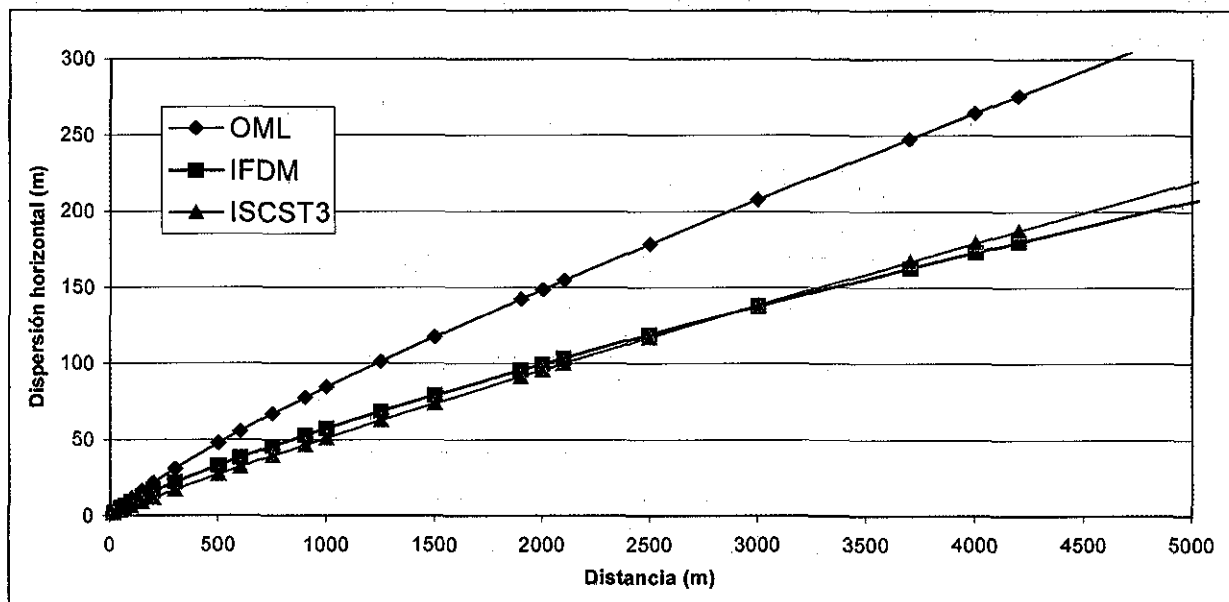


Figura 2.4 Comparación de los coeficientes de dispersión horizontal

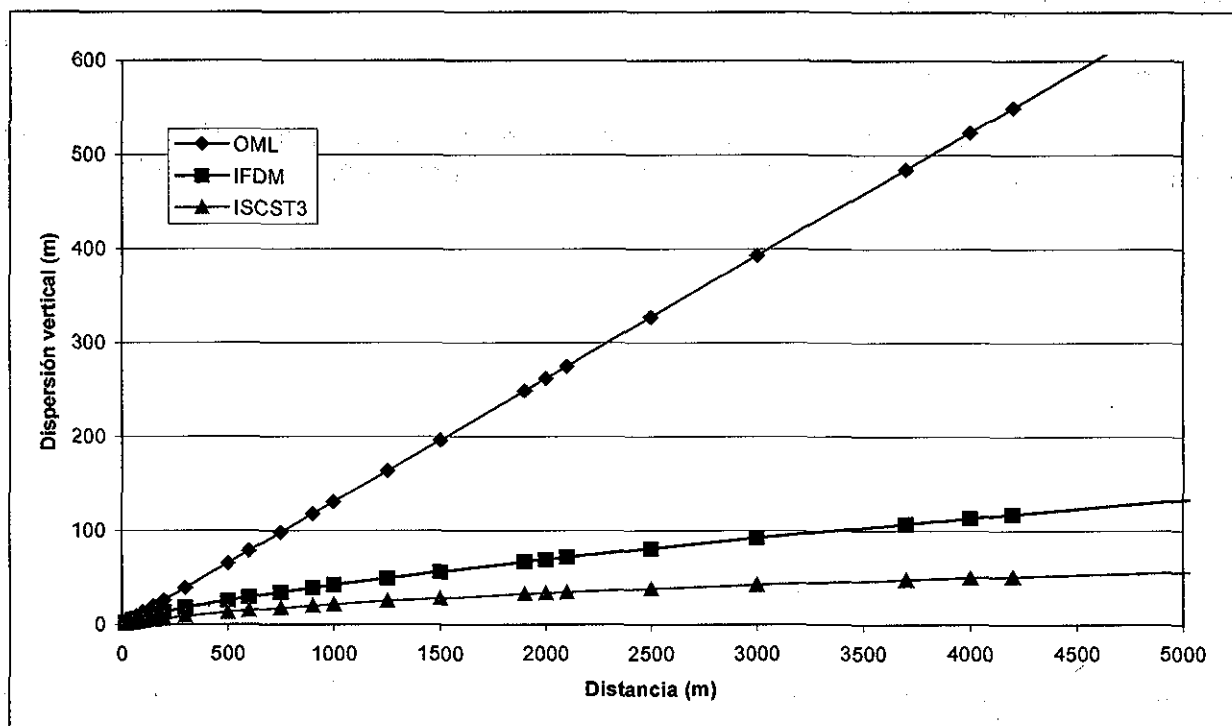


Figura 2.5 Comparación de los coeficientes de dispersión vertical

En las figuras 2.4 y 2.5 se aprecian diferencias en los valores calculados para los coeficientes de dispersión empleados en cada uno de los modelos, principalmente para

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

el coeficiente de dispersión vertical del modelo OML, que presenta una diferencia de 8.5 con respecto al coeficiente calculado por el modelo ISCST3, a una distancia de 2,500 m. y que esta diferencia aumenta al considerar mayores distancias.

### 2.7.3 Altura efectiva

Para el cálculo de la altura efectiva de emisión, el modelo IFDM (tabla 2.3) considera el flujo de calor (ecuación 2.11), mientras que el modelo OML (ecuación 2.16) y el modelo ISCST3 (ecuación 2.20) lo hacen en función de flujos buyantes y de momentum (ecuaciones 2.17). Los valores calculados para los diferentes modelos son:

Tabla 2.12 Valores de altura efectiva calculados.

Modelo	$h_e$ metros
IFDM	59.35
OML	11.47
ISC3	44.53

En los que se presentó una diferencia de 5 veces la magnitud del modelo IFDM y el OML.

### 2.7.4 Velocidad de viento a la altura efectiva

Para el cálculo de la velocidad de viento a una altura efectiva, los tres modelos considera expresiones de potencial en función de la velocidad de viento a una altura de referencia, la altura efectiva calculada en 2.7.3 y de la estabilidad atmosférica. Los valores calculados por cada modelo son:

Tabla 2.13 Valores de velocidad a la altura efectiva.

Modelo	$u_{h_e}$ m/s
IFDM	3.85
OML	1.61
ISC3	2.53

Se presentó una diferencia de 2.4 veces.

### 2.7.5 Comparación de concentración estimada

Las concentraciones de contaminantes obtenidas con los tres modelos presentaron grandes diferencias. La concentración máxima calculada por el modelo IFDM se presenta a 1,000 metros, la del modelo OML a 70 metros y la del modelo ISCST3 a 1,500 metros, como se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 2.14 Valores de concentración estimada.

Modelo	Distancia (m)	Concentración $\mu\text{g}/\text{m}^3$
IFDM	1,000	19.028
	2,000	12.429
	3,000	7.928
OML	1,000	26.710
	2,000	7.611
	3,000	3.630
ISCST3	1,000	41.11
	2,000	48.63
	3,000	37.10

Las concentraciones calculadas por los tres modelos se muestran en la figura 2.6, donde se puede apreciar que los modelos OML e IFDM, calcularon valores muy similares a distancias por arriba de 1,000 m.

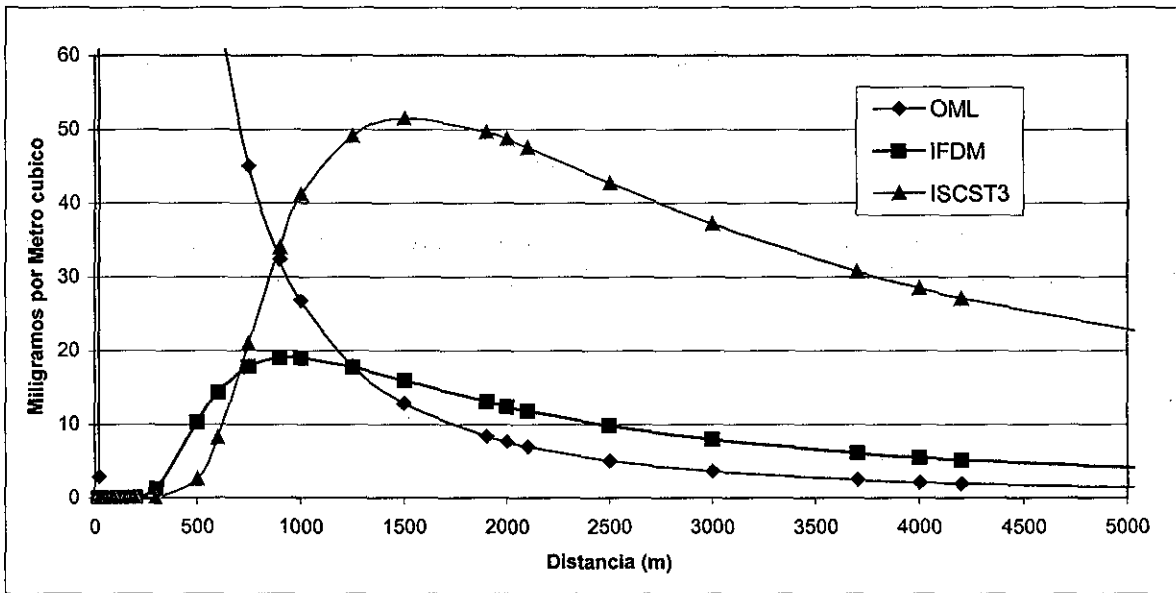
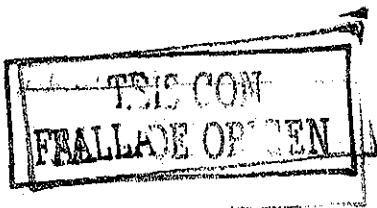


Figura 2.6 Concentración estimada por los modelo IFDM, OML e ISCST3





### 3. Análisis del desempeño del modelo

Para conocer el error involucrado al tomar una decisión es necesario conocer el error propagado por el modelo empleado.

El error asociado al uso de modelos matemáticos de dispersión atmosférica, se debe a las siguientes causas:

- La adquisición de datos, a través del monitoreo en campo genera un error que depende del equipo usado, el operador, la transmisión de información, redondeo de los valores y/o fallas en suministro eléctrico. Este error está presente en la medición de la velocidad del viento  $u$ , el gasto de emisión  $Q$ , temperatura del aire  $T_a$ , y temperatura del gas emitido  $T_g$ .
- Las suposiciones usadas en el desarrollo de los modelos (Venkatram, 1999), y el uso de fórmulas empíricas para el cálculo de variables incluidas en los modelos, puede generar errores considerables. Estos errores se presentan en la elevación de la pluma  $\Delta h$ , coeficientes de dispersión  $\sigma_z$  y  $\sigma_y$ , estabilidad atmosférica, etc... Por la naturaleza de las fórmulas empíricas en general se puede suponer que este error es mucho mayor que el error asociado por la adquisición de datos.

A continuación se mencionan dos problemas planteados por científicos en relación con el monitoreo.

¿Serán suficientes 10 observaciones durante un mes para representar las condiciones prevalecientes en la atmósfera durante este tiempo? (Venkatram, 1999).

Cuando solo se puede hacer muestreo en pocos sitios, será cuestionable la representatividad de la información obtenida. (Moussiopoulos, 1999).

#### 3.1 Error en los datos

##### 3.1.1 Magnitud del error para los datos de entrada

Se llevó a cabo una búsqueda bibliográfica para encontrar información sobre la magnitud del error que tienen los datos de entrada a los modelos.

En la literatura especializada (Maes, 1995) se reportan desviaciones para las estabildades calculadas, por los modelos IFDM e ISCST2 hasta del 62% (ver tabla 3.1).

Tabla 3.1 Diferencias en el calculo de estabilidad.

Modelo	Estable	Neutro	Inestable
IFDM	62% (E1,E2)	20% (E3,E7)	28% (E4,E5)
ISCST2	22% (E,F)	46% (D)	21% (A,B,C)

Debido a la naturaleza empírica de las fórmulas empleadas, se esperan errores más grandes que los que se puedan esperar para variables calculadas mediante fórmulas basadas en alguna ley física, o los reportados para valores monitoreados. Por lo anterior, se estimó el error para los coeficientes de dispersión a través de la comparación de los resultados generados en la sección (2.7.2, figuras 2.4 y 2.5), considerando que este puede llegar a ser de 40% hasta 560%.

La velocidad de viento a una altura de referencia es obtenida a través del monitoreo en campo; esta medición involucra errores debido al monitoreo, al azar y a la manipulación de los datos. En la literatura se encontró que la incertidumbre media para la velocidad del viento (tabla 3.2) varía de 1 a 10% y para el gasto de la emisión es de 10 a 50%.

Tabla 3.2 Errores de la velocidad de viento.

Incertidumbre	Fuente
$\pm 0.5 - 1.0 m/s$	Tesche et al., 1981
$\pm 10\%$	Seinfeld, 1988
$\pm 1 - 10\%$	Mason and Moses, 1984

En otro trabajo Kent, (1998) reporta que el error para la velocidad media del viento es de  $2.1 \pm 0.2 m/s$  a una altura de 10 metros.

Zavodsky, (2000) reporta que la incertidumbre esperada en los datos de la velocidad del viento van de 10% a 30%.

Los errores de los datos de entrada propuestos para el análisis de la propagación de error a través de los modelos seleccionados se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 3.3 Errores considerados para el estudio de los modelos.

Parámetro o dato	Unidades	Error
Q	g/s	30%
$h_e$	m	15%
$u_{h_e}$	m/s	10%
$\sigma_y$	-	50%
$\sigma_z$	-	50%

La magnitud de error seleccionado para los coeficientes de dispersión es de 50% con el fin de poder apreciar la propagación de error a través de los modelos, al considerar un

error moderado con respecto al rango de posibles errores que esta variable puede presentar.

### 3.1.2 Propagación del error

El error contenido en cada una de las variables (Wellens, 2001) y (Mathiesen, 1997) de entrada se combina, considerando que cada variable está compuesta de la siguiente manera  $\alpha^* = \alpha + \Delta\alpha$  donde  $\Delta\alpha$  representa el error absoluto de  $\alpha$  y el error relativo  $\varepsilon_\alpha$  puede calcularse dividiendo el error absoluto entre el valor de  $\alpha$ .

De manera más detallada: el error absoluto para la suma,  $a^* + b^*$ , se compone por el valor sin error  $a$  y su error absoluto  $\Delta a$ . El error relativo  $\varepsilon_a$  es la razón del error absoluto entre el valor sin error, de igual manera para  $b$  como se muestra a continuación

$$\begin{aligned} a^* &= a + \Delta a & \varepsilon_a &= \frac{\Delta a}{a} \\ b^* &= b + \Delta b & \varepsilon_b &= \frac{\Delta b}{b} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Sustituyendo las expresiones 3.1 y simplificando, se obtiene la expresión de propagación de error para la suma, como se muestra en la ecuación 3.2.

$$\begin{aligned} a^* + b^* &= (a + \Delta a) + (b + \Delta b) \\ &= a + b + \Delta a + \Delta b \\ \Delta_{(a+b)} &= \Delta a + \Delta b \\ \varepsilon_{a+b} &= \frac{\Delta_{(a+b)}}{a+b} = \frac{\Delta a + \Delta b}{a+b} = \frac{a\varepsilon_a + b\varepsilon_b}{a+b} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Donde el error relativo de la suma  $\varepsilon_{a+b}$  corresponde a un promedio pesado de los errores relativos de cada una de las variables consideradas.

Realizando el mismo planteamiento, se obtienen las expresiones de propagación de error para las diferentes operaciones aritméticas como son la multiplicación, la división y la función exponente.

Suma	$(a+b)$	error relativo $\varepsilon_{(a+b)} = \frac{a\varepsilon_a + b\varepsilon_b}{a+b}$	(3.3)
Multiplicación	$(ab)$	error relativo $\varepsilon_{(ab)} = (\varepsilon_a + 1)(\varepsilon_b + 1) - 1$	
División	$\left(\frac{a}{b}\right)$	error relativo $\varepsilon_{\left(\frac{a}{b}\right)} = \frac{(\varepsilon_a + 1)}{(\varepsilon_b + 1)} - 1$	

Exponente  $(ae^b)$  error relativo  $\varepsilon_{ae^b} = e^{\Delta b} (1 + \varepsilon_a) - 1$

### 3.2 Fórmulas analíticas de error para los modelos

Las fórmulas de propagación del error para los diferentes modelos gaussianos seleccionados se desarrollaron empleando las expresiones de propagación de error presentadas en el inciso anterior.

#### 3.2.1 Fórmula del modelo IFDM

Considerando la expresión aritmética del modelo gaussiano IFDM (fórmula 2.7), se desarrolló la siguiente fórmula analítica de propagación del error.

$$\varepsilon_{IFDM} = \frac{(1 + \varepsilon_Q)}{(1 + \varepsilon_{\sigma_x})(1 + \varepsilon_{\sigma_y})(1 + \varepsilon_u)} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} \left[\frac{1}{(1 + \varepsilon_{\sigma_y})^2} - 1\right]\right] \exp\left[-\frac{h_e^2}{2\sigma_z^2} \left[\left(\frac{1 + \varepsilon_{h_e}}{1 + \varepsilon_{\sigma_z}}\right)^2 - 1\right]\right] - 1 \quad (3.4)$$

#### 3.2.2 Fórmula del modelo OML

Considerando la expresión aritmética del modelo gaussiano OML (fórmula 2.12), se desarrolló la siguiente fórmula analítica de propagación del error.

$$\varepsilon_{OML} = \left[ \frac{(1 + \varepsilon_Q)}{(1 + \varepsilon_u)(1 + \varepsilon_{\sigma_y})(1 + \varepsilon_{\sigma_z})} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} \left[\frac{1}{(1 + \varepsilon_{\sigma_y})^2} - 1\right]\right) \right. \\ \left. \left( 1 + \frac{\exp\left(-\frac{h_e^2}{2\sigma_z^2}\right) \left( \exp\left(-\frac{h_e^2}{2\sigma_z^2} \left[\frac{(1 + \varepsilon_{h_e})^2}{(1 + \varepsilon_{\sigma_z})^2} - 1\right]\right) - 1 \right) + \Delta \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{(2iL - h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(2iL + h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right)}{\exp\left(-\frac{h_e^2}{2\sigma_z^2}\right) + \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{(2iL - h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(2iL + h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right)} \right) - 1 \right] \quad (3.5)$$

en donde

$$\Delta \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-(2iL-h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(2iL+h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) =$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-(2iL-h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) \cdot \left( \exp\left(\frac{-(2iL-h_e)^2}{2\sigma_z^2} \left( \frac{1 + \left( \frac{2iL \cdot \varepsilon_L - h_e \cdot \varepsilon_{h_e}}{2iL - h_e} \right)^2}{(1 + \varepsilon_{\sigma_z})^2} - 1 \right) - 1 \right) \right) +$$

$$\exp\left(\frac{-(2iL+h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) \cdot \left( \exp\left(\frac{-(2iL+h_e)^2}{2\sigma_z^2} \left( \frac{1 + \left( \frac{2iL \cdot \varepsilon_L + h_e \cdot \varepsilon_{h_e}}{2iL + h_e} \right)^2}{(1 + \varepsilon_{\sigma_z})^2} - 1 \right) - 1 \right) \right)$$

### 3.2.3 Fórmula del modelo ISCST3

Este modelo considera reflexiones dentro del término vertical (fórmula 2.18), la fórmula analítica, que describe la propagación de error es:

$$\varepsilon_{ISCST3} = \frac{(1 + \varepsilon_Q)}{(1 + \varepsilon_{\sigma_x})(1 + \varepsilon_{\sigma_y})(1 + \varepsilon_u)} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} \left[ \frac{1}{(1 + \varepsilon_{\sigma_y})^2} - 1 \right] (\varepsilon_{TV} + 1) - 1 \right) \quad (3.6)$$

Donde  $\varepsilon_{TV}$  es

$$\varepsilon_{TV} = \frac{\sum_{i=1}^n \left\{ \exp\left(-0.5 \left(\frac{H_1}{\sigma_z}\right)^2\right) \varepsilon_{\exp\left(-0.5 \left(\frac{H_4}{\sigma_z}\right)^2\right)} + \exp\left(-0.5 \left(\frac{H_2}{\sigma_z}\right)^2\right) \varepsilon_{\exp\left(-0.5 \left(\frac{H_4}{\sigma_z}\right)^2\right)} + \right.}{\sum_{i=1}^n \left. \exp\left(-0.5 \left(\frac{H_1}{\sigma_z}\right)^2\right) + \exp\left(-0.5 \left(\frac{H_2}{\sigma_z}\right)^2\right) + \exp\left(-0.5 \left(\frac{H_3}{\sigma_z}\right)^2\right) + \exp\left(-0.5 \left(\frac{H_4}{\sigma_z}\right)^2\right) \right\}} \quad (3.7)$$

Considerando que  $(H_1, H_2, H_3$  y  $H_4)$  son

$$H_1 = z_r - (2iz_i - h_e) \quad \varepsilon_{H_1} = \frac{-(2iz_i \varepsilon_{z_i} - h_e \varepsilon_{h_e})}{z_r - (2iz_i - h_e)} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned}
 H_2 &= z_r + (2iz_i - h_e) & \varepsilon_{H_2} &= \frac{(2iz_i \varepsilon_{z_i} - h_e \varepsilon_{h_e})}{z_r + (2iz_i - h_e)} \\
 H_3 &= z_r - (2iz_i + h_e) & \varepsilon_{H_3} &= \frac{-(2iz_i \varepsilon_{z_i} + h_e \varepsilon_{h_e})}{z_r - (2iz_i + h_e)} \\
 H_4 &= z_r + (2iz_i + h_e) & \varepsilon_{H_4} &= \frac{(2iz_i \varepsilon_{z_i} + h_e \varepsilon_{h_e})}{z_r + (2iz_i + h_e)}
 \end{aligned}$$

Y que la fórmula de error del término exponencial que considera ( $H_1$ ) es:

$$\varepsilon_{\exp - 0.5 \left( \frac{H_1}{\sigma_z} \right)^2} = \exp \left( -0.5 \left( \frac{H_1}{\sigma_z} \right)^2 \left( \left( \frac{(\varepsilon_{H_1} + 1)}{(\varepsilon_{\sigma_z} + 1)} \right)^2 - 1 \right) \right) - 1$$

Se desarrolla de la misma manera para ( $H_2, H_3$  y  $H_4$ ).

### 3.3 Evaluación estadística

El análisis del desempeño de los modelos se realiza por métodos gráficos y/o estadísticos. Los métodos gráficos presentan resultados a través de gráficas de cajas como  $C_p/C_o$  (concentración modelada dividida por la observada) contra cualquier parámetro, por ejemplo, distancia, velocidad del viento, altura de mezcla, hora del día, etc. Mientras que la evaluación estadística emplea diferentes índices estadísticos por ejemplo; media, sesgo, desviación y varianza.

La exactitud en el monitoreo está sujeta a incertidumbre no solo debido a los instrumentos de medición, sino también por el procesamiento y transmisión de los datos. Existen errores inherentes al azar, esto implica que las evaluaciones estadísticas progresivamente se volverán mas confiables al aumentar la cantidad de datos analizados.

#### 3.3.1 Importancia de la evaluación estadística

Mediante la evaluación estadística se comparan las estimaciones de los modelos contra valores monitoreados en campo, que al aplicarles diferentes índices estadísticos, se describe el desempeño del modelo. En la actualidad no existe una única prueba que indique si un modelo tiene un buen desempeño.

Con el fin de analizar el desempeño de diferentes modelos usados a nivel mundial, la comunidad científica ha organizado conferencias para unificar criterios al evaluar modelos por ejemplo:

- Workshop on Dispersion Model Performance.

- Workshops of the Harmonisation.

En estas reuniones se discute la manera de llevar a cabo y presentar la evaluación estadística de los modelos de dispersión de contaminantes. El paquete "Model Validation Kit" es el resultado del Workshop of the Harmonisation

### 3.3.2 Índices estadísticos más empleados

Se han desarrollado varias metodologías para evaluar a los modelos de dispersión de contaminantes; U.S. EPA and EPRI Modelo Evaluation Procedures (Hanna, S., 1988), Model Validation Kit (Olesen, H.R. 1994).

El desarrollo del "Model Validation Kit" es el trabajo de Stefan Hanna y Helgen Olesen (Olesen, 1994), y contiene datos meteorológicos y concentraciones máximas observadas para los tres experimentos; Kindcaid, Copenhagen y Lillestrom; que comparando mediciones contra resultados de modelos.

El "Model validation Kit" basa sus cálculos en la comparación de la concentración máxima observada para cada experimento contra la calculada con datos meteorológicos. Tiene como finalidad, comparar diferentes modelos al hacer una evaluación estadística, empleando los índices estadísticos; promedio ( $\bar{O}, \bar{P}$ ), sesgo (B), sesgo fraccionado (FB), desviación estándar (S), desviación estándar fraccionada (FS), correlación ( $\pi$ ), factor dos (FA2) y error cuadrado normalizado (NMSE).

Estos índices estadísticos se detallan a continuación.

- El promedio se calcula para las concentraciones observadas así como para las predichas, y se define como:

$$\bar{O} = \sum_{i=1}^N \frac{O_i}{N}; \quad \bar{P} = \sum_{i=1}^N \frac{P_i}{N}; \quad (3.9)$$

$N$  corresponde al número total de valores.

- El sesgo (B) se define como la diferencia del promedio observado menos el promedio simulado y se representa como:

$$B = \bar{O} - \bar{P} \quad (3.10)$$

Cuando el sesgo tome un valor  $B > 0$  el promedio del modelo subestima las concentraciones o datos observados y viceversa.

- El sesgo fraccionado, (FB) se define como el doble de la diferencia de los promedios de las concentraciones observadas menos las simuladas, entre la suma de los promedios

$$FB = \frac{2(\bar{O} - \bar{P})}{\bar{O} + \bar{P}} \quad (3.11)$$

El sesgo fraccionado tiene en valores entre  $-2$  y  $+2$ , cuando el valor del sesgo fraccionado sea  $> 0$  las concentraciones medidas han sido subestimadas.

- La desviación estándar, S, es un índice estadístico que se define como la raíz cuadrada del promedio de los cuadrados de la diferencia entre datos puntuales con el promedio. Este índice se calcula tanto para las concentraciones observadas como para las simuladas

$$S_o = \sqrt{\sum \frac{(O_i - \bar{O})^2}{N}}; S_p = \sqrt{\sum \frac{(P_i - \bar{P})^2}{N}}; \quad (3.12)$$

- La desviación estándar fraccionada, FS, se define como dos veces la razón de la diferencia de las desviaciones estándar observadas y simuladas entre la suma de las mismas.

$$FS = 2 \frac{S_o - S_p}{S_o + S_p} \quad (3.13)$$

Este índice genera valores entre  $-2$  y  $+2$ . Cuando se obtienen valores positivos para FS, la dispersión de los valores simulados es menor que la dispersión de las observaciones.

- El coeficiente de correlación,  $\pi$ , se define como la razón del producto de las concentraciones observadas y simuladas con respecto a su promedio, y el producto de las desviaciones estándar observadas y simuladas.

$$\pi = \frac{(\bar{O} - \bar{O})(\bar{P} - \bar{P})}{S_o S_p} \quad (3.14)$$

Con un modelo perfecto se obtiene un coeficiente de correlación de  $+1$ , los rangos para este índice son entre  $-1$  y  $+1$ .

- El factor dos (FA2) se define como el porcentaje de datos para los cuales la razón de la concentración simulada y la observada, se encuentre entre  $0.5$  y  $2$ .



$$\text{FA2} \quad 0.5 \leq \frac{P_i}{O_i} \leq 2 \quad (3.15)$$

El uso de un modelo perfecto da un valor de  $\text{FA2} = 1$ .

- El error medio cuadrático normalizado (NMSE) se define como la razón del promedio de los cuadrados de la diferencia de las concentraciones observadas y las simuladas, y el producto de los promedios de las concentraciones observadas y las simuladas. Se representa en forma matemática como:

$$\text{NMSE} = \frac{(O - P)^2}{\bar{O}\bar{P}} \quad (3.16)$$

Un modelo perfecto resulta en  $\text{NMSE} = 0$ , el valor de este índice es siempre positivo.

### 3.3.3 Fórmulas analíticas de error para los índices estadísticos

- Las expresiones del promedio (ecuación 3.9) tienen las siguientes fórmulas de propagación de error:

$$\varepsilon_{\bar{O}} = \frac{\sum_{i=1}^N (O_i \cdot \varepsilon_{O_i})}{\sum_{i=1}^N O_i} \quad \varepsilon_{\bar{P}} = \frac{\sum_{i=1}^N (P_i \cdot \varepsilon_{P_i})}{\sum_{i=1}^N P_i} \quad (3.17)$$

- La expresión del sesgo (ecuación 3.10) tiene la siguiente fórmula de propagación de error:

$$\varepsilon_B = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i \cdot \varepsilon_{O_i}) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (P_i \cdot \varepsilon_{P_i})}{\bar{O} - \bar{P}} = \frac{\bar{O}\varepsilon_{O_i} - \bar{P}\varepsilon_{P_i}}{\bar{O} - \bar{P}} \quad (3.18)$$

- El sesgo fraccionado FB (ecuación 3.11) tiene la siguiente fórmula de propagación de error:

$$\varepsilon_{FB} = \frac{(\bar{O}(\varepsilon_{\bar{O}} + 1) - \bar{P}(\varepsilon_{\bar{P}} + 1))(\bar{O} + \bar{P})}{(\bar{O}(\varepsilon_{\bar{O}} + 1) + \bar{P}(\varepsilon_{\bar{P}} + 1))(\bar{O} - \bar{P})} - 1 \quad (3.19)$$

- La desviación estándar (ecuación 3.12) tiene las siguientes fórmulas de propagación de error:

$$\varepsilon_{S_o} = \left( \frac{\sum (O_i(\varepsilon_{O_i} + 1) - \bar{O}(\varepsilon_{\bar{O}} + 1))^2}{\sum (O_i - \bar{O})^2} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \quad \varepsilon_{S_p} = \left( \frac{\sum (P_i(\varepsilon_{P_i} + 1) - \bar{P}(\varepsilon_{\bar{P}} + 1))^2}{\sum (P_i - \bar{P})^2} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \quad (3.20)$$

- o La desviación estándar fraccionada FS (ecuación 3.13) tiene la siguiente fórmula de propagación de error:

$$\varepsilon_{FS} = \frac{(S_o(\varepsilon_{S_o} + 1) - S_s(\varepsilon_{S_s} + 1))(S_o + S_s)}{(S_o(\varepsilon_{S_o} + 1) + S_s(\varepsilon_{S_s} + 1))(S_o - S_s)} - 1 \quad (3.21)$$

- o El coeficiente de correlación  $\pi$  (ecuación 3.14) tiene la siguiente fórmula de propagación de error:

$$\varepsilon_{\pi} = \frac{\sum [O_i(\varepsilon_{O_i} + 1) - \bar{O}(\varepsilon_{\bar{O}} + 1)][P_i(\varepsilon_{P_i} + 1) - \bar{P}(\varepsilon_{\bar{P}} + 1)]}{\sum (O_i - \bar{O})(P_i - \bar{P})} \frac{1}{(\varepsilon_{S_o} + 1)(\varepsilon_{S_p} + 1)} - 1 \quad (3.22)$$

- o El FA2 (ecuación 3.15) tiene la siguiente fórmula de propagación de error:

$$\varepsilon_{\frac{P}{O}} = \frac{(\varepsilon_{P_i} + 1)}{(\varepsilon_{O_i} + 1)} - 1 \quad (3.23)$$

- o El error cuadrado medio normalizado NMSE (ecuación 3.16) tiene la siguiente fórmula de propagación de error:

$$\varepsilon_{NMSE} = \frac{\left( \frac{\sum (O_i(\varepsilon_{O_i} + 1) - P_i(\varepsilon_{P_i} + 1))^2}{\sum (O_i - P_i)^2} \right)}{(\varepsilon_o + 1)(\varepsilon_p + 1)} - 1 \quad (3.24)$$

#### 4. Propagación de error

En esta sección se analiza el desempeño del modelo gaussiano, utilizando como herramienta las fórmulas de error desarrolladas previamente, posteriormente se analiza la propagación de error a través de cada índice estadístico.

##### 4.1 Propagación de error a través de cada término

Para analizar en qué forma se propaga el error de los datos de entrada a través de las expresiones matemáticas correspondientes a los modelos gaussianos IFDM, OML y ISCT3, se utilizó el conjunto de datos de la tabla 2.11 y las fórmulas presentadas en la sección 3.2. Estas fórmulas se trabajaron con diferentes valores de error, para considerar casos de subestimación y sobreestimación del error. Dicho análisis se realizó considerando los términos concentración, horizontal y vertical por separado, debido a que las expresiones de los términos concentración y horizontal son idénticas para los tres modelos, pero no así el término vertical, en el que se realiza el análisis para cada modelo.

##### 4.1.1 Término concentración

El término concentración presenta un comportamiento asintótico con respecto a la distancia  $x$ , donde el valor del término disminuye hacia cero con respecto a la distancia, como se muestra en la figura 4.1.

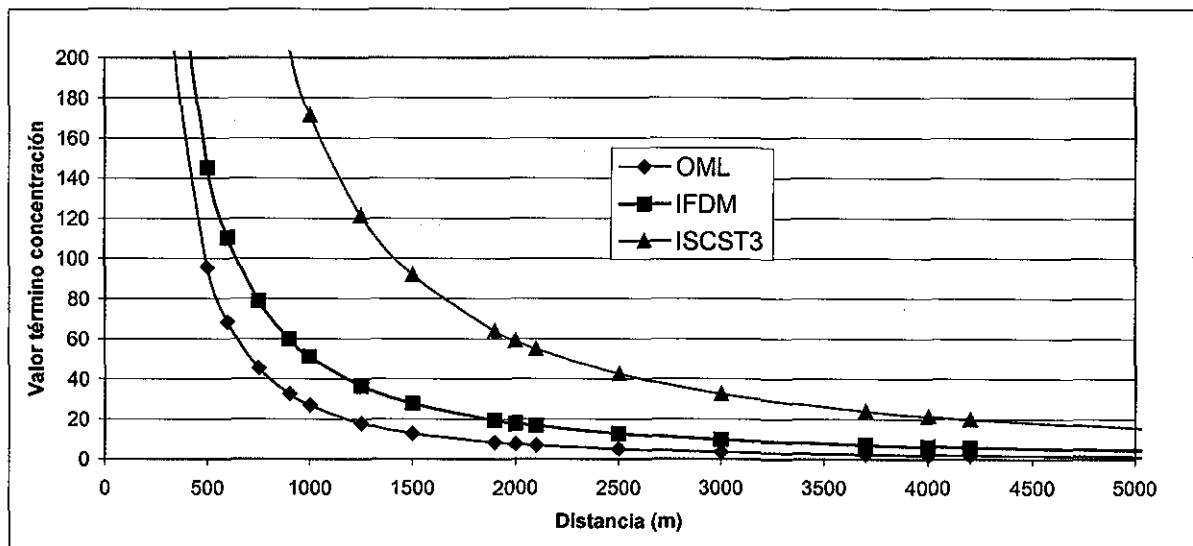


Figura 4.1 Comportamiento del término concentración.

La fórmula 4.1 calcula el error propagado a través del término concentración.

$$\varepsilon_c = \left[ \frac{(1 + \varepsilon_Q)}{(1 + \varepsilon_u)(1 + \varepsilon_{\sigma_y})(1 + \varepsilon_{\sigma_z})} \right] - 1 \quad (4.1)$$

La propagación de error por el término concentración es constante, ya que solamente depende de los errores relativos de la emisión, la velocidad del viento y los coeficientes de dispersión horizontal y vertical

Con los valores de error presentados en la tabla 3.3, se calculó el error del término concentración, considerando casos de sobreestimación y subestimaciones de los errores de la emisión, velocidad de viento y coeficientes de dispersión.

En general se observa lo siguiente:

- Dependiendo de la combinación de errores  $\varepsilon_u, \varepsilon_Q, \varepsilon_{\sigma_y}$  y  $\varepsilon_{\sigma_z}$  el término de concentración puede subestimar o sobreestimar el error propagado. En general conviene más subestimar o en su caso sobreestimar TODAS las variables de entrada, ya que esto ocasiona que se cancelen ciertos errores. En caso de que:

$$(1 + \varepsilon_Q) = (1 + \varepsilon_u)(1 + \varepsilon_{\sigma_y})(1 + \varepsilon_{\sigma_z})$$

el error en el término concentración se vuelve 0, ya que el cociente en la ecuación 4.1 se iguala a uno. Sin embargo, por los errores altos que se pueden esperar para  $\varepsilon_{\sigma_y}$  y  $\varepsilon_{\sigma_z}$ , es difícil que se cumpla esta condición.

- Debido al alto error encontrado para los coeficientes de dispersión (ver sección 2.7.2 y 3.1.1), éste determina el rango de errores considerados dentro del análisis del término concentración, presentando un efecto que al aumentar el error de los coeficientes de dispersión, aumenta el error del término concentración.
- Aún en ausencia de error en la velocidad de viento y la emisión, se tendrá un error importante en el término concentración a causa del error de los coeficientes de dispersión; por ejemplo al considerar una subestimación del error de  $-50\%$  para los coeficientes de dispersión  $\varepsilon_{\sigma_y}$  y  $\varepsilon_{\sigma_z}$  el error propagado por el término concentración se sobreestima en  $300\%$ .

$$\varepsilon = \left[ \frac{1}{(1 + \varepsilon_{\sigma_y})(1 + \varepsilon_{\sigma_z})} \right] - 1$$

mientras que al considerar una sobreestimación del error de  $50\%$  para los coeficientes de dispersión el error propagado por el término se subestima con  $-56\%$ .



- La subestimación en los datos de entrada tiene un efecto diferente que la sobreestimación. Así por ejemplo, la subestimación de los coeficientes de dispersión vertical en un cincuenta por ciento genera, errores entre 200% y 450% (sobreestimación) para el término de concentración, considerando los errores de error de la tabla 3.3 para la velocidad de viento y la emisión, mientras que la sobreestimación de los coeficientes de dispersión en la misma proporción general valores entre -39% y -67% (subestimación).
- Cuando se subestiman los coeficientes de dispersión, el peor escenario es cuando  $\varepsilon_u = 20\%$  (máxima sobreestimación en  $u$ ) y  $\varepsilon_Q = -10\%$  (máxima subestimación en  $Q$ ) y viceversa.

#### 4.1.2 Término horizontal

La propagación de error debido al término horizontal se analiza con la fórmula 4.2, que involucra el coeficiente de dispersión horizontal, el error relativo del coeficiente y la distancia  $y$ .

$$\varepsilon_{TV} = \exp - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} \left[ \left( \frac{1}{1 + \varepsilon_{\sigma_y}} \right)^2 - 1 \right] - 1 \quad (4.2)$$

La  $y$  representa la distancia perpendicular a la trayectoria del viento a una distancia  $x$  a partir de la fuente de emisión. El valor de la exponencial que contiene  $y$  tiende a uno conforme  $x$  aumenta. Cuando el valor de  $y$  es cero, se calcula la concentración sobre el eje  $x$  y el término concentración no propaga error.

La fórmula 4.2 considera el error relativo del coeficiente de dispersión horizontal  $\varepsilon_{\sigma_y}$ . Que a valores cercanos a -100% (subestimación) del coeficiente de dispersión horizontal la fórmula es muy sensible propagando mas error, para estudiar la propagación de error a través del término horizontal, se estudia el siguiente término de la fórmula 4.2.

$\left( \frac{1}{1 + \varepsilon_{\sigma_y}} \right)^2 - 1$ , considerando tres casos que se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 4.1 Casos considerados en el estudio del término horizontal.

Caso	$\varepsilon_{\sigma_y}$	Valor de $\left( \frac{1}{1 + \varepsilon_{\sigma_y}} \right)^2 - 1$
1	$\varepsilon_{\sigma_y} < -100\%$	Tiende de -1 a infinito
2	$\varepsilon_{\sigma_y} = -100\%$	indeterminado

3	$\varepsilon_{\sigma_y} > -100\%$	Decrece del infinito hasta -1
---	-----------------------------------	-------------------------------

De forma gráfica:

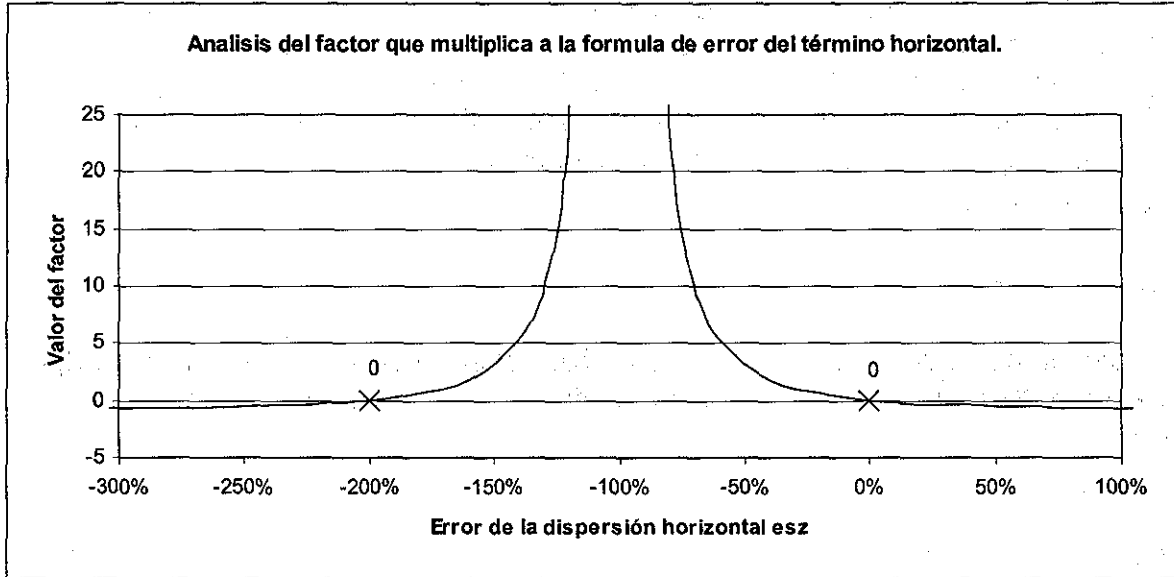


Figura 4.2 Comportamiento de la expresión  $\left(\frac{1}{1+\varepsilon_{\sigma_y}}\right)^p - 1$

La figura 4.2 muestra la zona de indeterminación, para el término  $\left(\frac{1}{1+\varepsilon_{\sigma_y}}\right)^p - 1$  de la fórmula, donde el error propagado tiende a infinito al subestimar el error del coeficiente de dispersión horizontal con  $-100\%$ , presentando una región de propagación de error muy sensible a errores del coeficiente de dispersión horizontal cercanos a  $-100\%$ .

Para analizar la propagación a través del término horizontal se consideran diferentes errores que se muestran en la (tabla 4.2) para los coeficientes de dispersión horizontal, considerando una distancia de  $y = 15$  m perpendicular a la trayectoria de la dispersión, los valores de error presentados en la tabla 4.2 son los empleados en el análisis del término concentración (sección 4.1.1) y otros en la región de gran sensibilidad, cercanía de  $-100\%$ .

Tabla 4.2 Errores considerados en el estudio del término horizontal.

Caso	$\varepsilon_{\sigma_y}$ (%)
1	100
2	50
3	20

4	0
5	-20
6	-50
7	-95
8	-100
9	-130
10	-170
11	-200

El comportamiento del término horizontal para diferentes errores del coeficiente de dispersión horizontal se muestra en la siguiente figura.

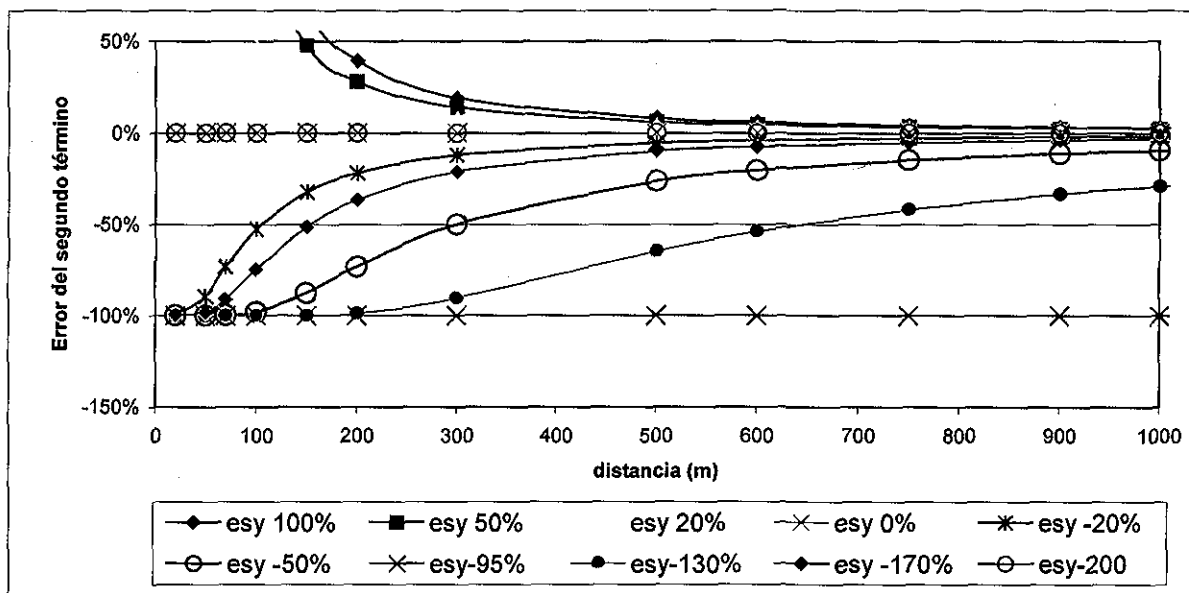


Figura 4.2 Contribución al error debido al término horizontal.

El término horizontal propaga error a distancias menores de 500 metros. Existe una zona de indeterminación cuando el error del coeficiente de dispersión horizontal es de -100% propagando un error de -100%.

En general el error debido al término horizontal tiende a cero con la distancia, como consecuencia de que el valor del término y su error disminuye al aumentar la distancia y de que el error relativo del coeficiente de dispersión horizontal no sea subestimado entre -90 a -110 %. Por lo que se recomienda sobreestimar el error del coeficiente de dispersión horizontal.

#### 4.1.3 Término vertical

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Considerando las diferencias del término vertical que presentan los tres modelos, estos se analizan independientemente, calculando la propagación de error a través del término vertical de cada modelo, empleando las fórmulas de error desarrolladas en la sección 3.2.

- El modelo IFDM considera reflexiones en la superficie del terreno, presentando la expresión mas sencilla, similar a la del término horizontal (sección 4.1.2). La siguiente fórmula (fórmula 4.3), es una función exponencial inversamente proporcional a la dispersión vertical y la altura efectiva de la emisión.

$$V_{\text{IFDM}} = \exp\left(-\frac{h_e^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (4.3)$$

- El modelo OML presenta el mismo término que el modelo IFDM y adicionalmente una sumatoria en función de la altura de capa de mezcla, que considera fuentes imaginarias para representar el efecto de reflexión de contaminantes debido a la capa de mezcla.

$$V_{\text{OML}} = \exp\left(\frac{-h_e^2}{2\sigma_z^2}\right) + \sum_{i=1}^{\infty} \left( \exp\left(\frac{-(2iL - h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(2iL + h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right) \quad (4.4)$$

- El modelo ISC3 tiene dos términos exponenciales que consideran la altura del receptor  $z_r$ , junto con una sumatoria que considera emisiones imaginarias para describir reflexiones debido a la capa de mezcla y a la superficie.

$$V_{\text{ISC3}} = \exp\left(-0.5\left(\frac{z_r - h_e}{\sigma_z}\right)^2\right) + \exp\left(-0.5\left(\frac{z_r + h_e}{\sigma_z}\right)^2\right) + \sum_{i=1}^{\infty} \left\{ \exp\left(-0.5\left(\frac{H_1}{\sigma_z}\right)^2\right) + \exp\left(-0.5\left(\frac{H_2}{\sigma_z}\right)^2\right) + \exp\left(-0.5\left(\frac{H_3}{\sigma_z}\right)^2\right) + \exp\left(-0.5\left(\frac{H_4}{\sigma_z}\right)^2\right) \right\} \quad (4.5)$$

En la comparación del término vertical calculado por los diferentes modelos se consideraron los errores de la tabla 4.2. La siguiente gráfica muestra el comportamiento.





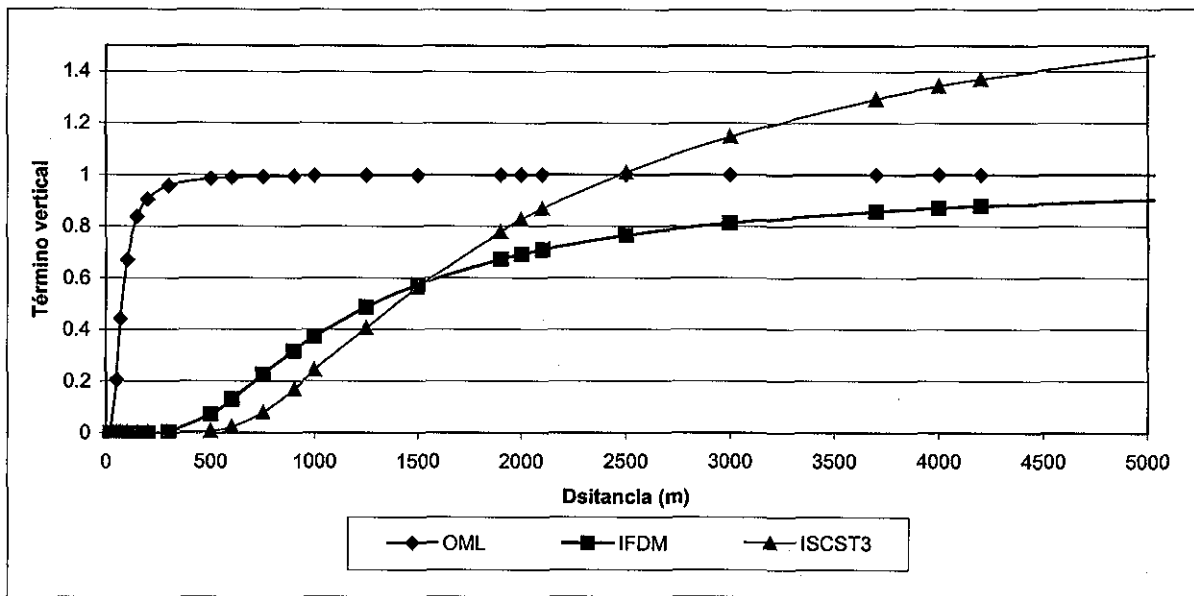


Figura 4.3 Comportamiento del término vertical.

A continuación se analiza el término vertical de cada modelo.

#### 4.1.3.1. IFDM

La ecuación 4.6 describe la propagación de error debido al término vertical del modelo IFDM (ecuación 4.3), esta expresión considera el error relativo de la altura efectiva de la emisión y el error relativo del coeficiente de dispersión vertical.

$$\varepsilon_{V_{IFDM}} = \exp\left(-\frac{h_e^2}{2\sigma_z^2} \left[ \frac{(1 + \varepsilon_{h_e})^2}{(1 + \varepsilon_{\sigma_z})^2} - 1 \right]\right) - 1 \quad (4.6)$$

La expresión de error del término vertical presenta una indeterminación cuando el error relativo del coeficiente de dispersión vertical es  $\varepsilon_{\sigma_z} = -100\%$ , propagando un error de  $-100\%$ , el mismo error es propagado cuando el error relativo de la altura efectiva es  $\varepsilon_{h_e} = -100\%$ , sin importar el error relativo del coeficiente de dispersión vertical.

La propagación de error es muy sensible con errores relativos al rededor de  $\varepsilon_{h_e} = -100\%$ .

Se observan tres efectos dependiendo de los errores relativos de la altura y del coeficiente de dispersión, estos efectos se estudian considerando los casos de la tabla 4.3.

Tabla 4.3 Casos de estudio del término vertical modelo IFDM.

Caso	Valor de $\frac{(1 + \varepsilon_{h_e})^2}{(1 + \varepsilon_{\sigma_z})^2}$	Error del término vertical IFDM
1	<1	Positivo
2	=1	0%
3	>1	Negativo

Se estudio la propagación de error sobreestimando de error relativo de la altura efectiva con 15%, para diferentes errores relativos de los coeficientes de dispersión vertical, que gráficamente se muestra en la figura 4.4.

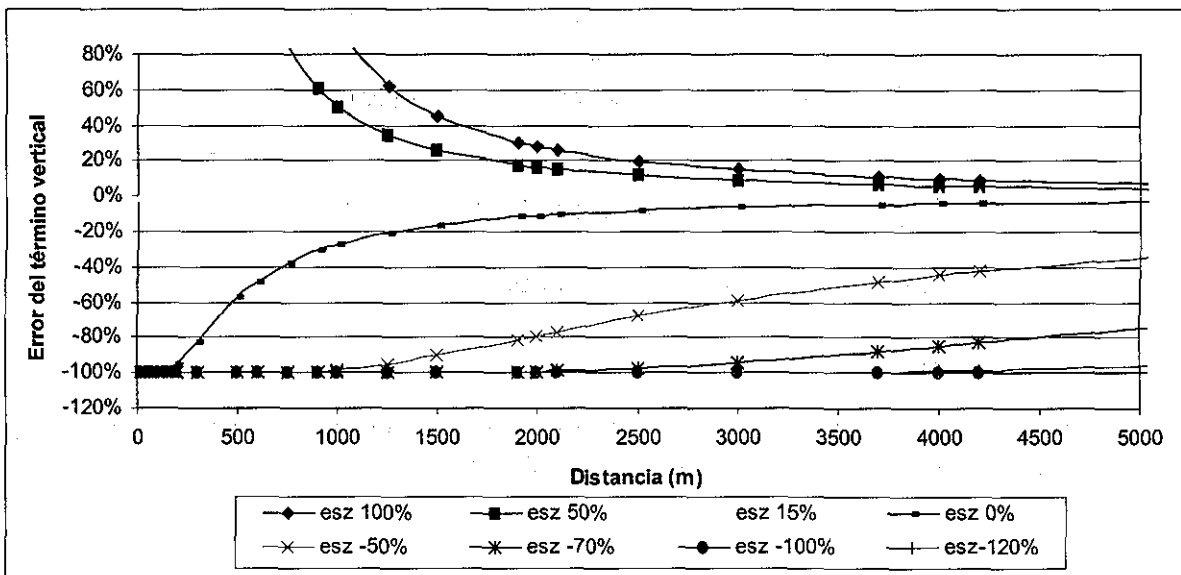


Figura 4.4 Aportación del término vertical modelo IFDM con  $\varepsilon_{h_e} = 15\%$ .

En conclusión, el término vertical es sensible para errores del coeficiente de dispersión vertical cercanos a -100%, resultando en la propagación de -100% de error. Se presenta un efecto de abatimiento del error cuando los errores del coeficiente de dispersión vertical y de la altura efectiva presentan la misma magnitud. Por lo que se recomienda trabajar con la misma magnitud de error de la altura efectiva y del coeficiente de dispersión vertical o sobreestimando el error del coeficiente de dispersión vertical.

#### 4.1.3.2. OML

El término vertical (ecuación 4.4) es un caso modificado del término vertical del modelo IFDM, que presenta adicionalmente una suma infinita para describir el efecto de reflexión de los contaminantes debido a la presencia de la capa de mezcla. Empleando



los datos de la tabla 2.11. se analizó la aportación de cada expresión del término vertical, que graficamente se muestra en la figura 4.5.

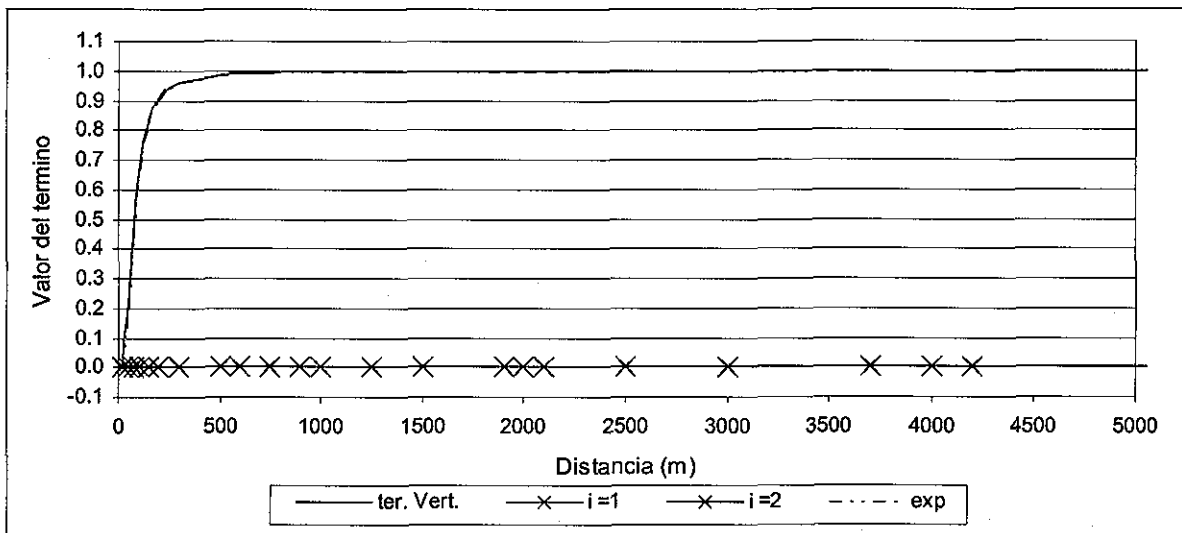


Figura 4.5 Comportamiento del término vertical modelo OML.

La expresión (4.7), describe la propagación de error a través del término vertical.

$$\epsilon_{V_{OML}} = \frac{\exp\left(-\frac{h_e^2}{2 \cdot \sigma_z^2}\right) \left( \exp\left(-\frac{h_e^2}{2 \cdot \sigma_z^2} \cdot \left[ \frac{(1 + \epsilon_{h_e})^2}{(1 + \epsilon_{\sigma_z})^2} - 1 \right] \right) - 1 \right) + \Delta \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-(2iL - h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(2iL + h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right)}{\exp\left(\frac{-h_e^2}{2\sigma_z^2}\right) + \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-(2iL - h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(2iL + h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right)} \quad (4.7)$$

Donde

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

$$\Delta \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-(2iL-h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(2iL+h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) =$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-(2iL-h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) \cdot \left( \exp\left[ \frac{-(2iL-h_e)^2}{2\sigma_z^2} \left( \frac{1 + \left( \frac{2iL \cdot \varepsilon_L - h_e \cdot \varepsilon_{h_e}}{2iL - h_e} \right)^2}{(1 + \varepsilon_{\sigma_z})^2} - 1 \right) \right] - 1 \right) +$$

$$\exp\left(\frac{-(2iL+h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) \cdot \left( \exp\left[ \frac{-(2iL+h_e)^2}{2\sigma_z^2} \left( \frac{1 + \left( \frac{2iL \cdot \varepsilon_L + h_e \cdot \varepsilon_{h_e}}{2iL + h_e} \right)^2}{(1 + \varepsilon_{\sigma_z})^2} - 1 \right) \right] - 1 \right)$$

La expresión anterior considera la altura efectiva ( $h_e$ ), la altura de Monin Obukhov ( $L$ ) y el coeficiente de dispersión vertical ( $\sigma_z$ ).

La fórmula de error 4.7., se indetermina cuando el error del coeficiente de dispersión vertical se subestima con  $-100\%$ , para explicar el comportamiento de esta indeterminación se consideran los siguientes casos.

Tabla 4.4 Casos de estudio del término vertical modelo OML.

Caso	Valor de $\frac{\left(1 + \left(\frac{2iL \cdot \varepsilon_L + h_e \cdot \varepsilon_{h_e}}{2iL + h_e}\right)^2\right)}{(1 + \varepsilon_{\sigma_z})^2}$	Error del término vertical del modelo OML
1	$>1$	Positivo
2	$=1$	Positivo y tiende a cero
3	$<1$	Negativo
4	$\varepsilon_{\sigma_z} = -100\%$	Indeterminado

El efecto de tener diferentes errores en el coeficiente de dispersión vertical se aprecia en la figura 4.6.

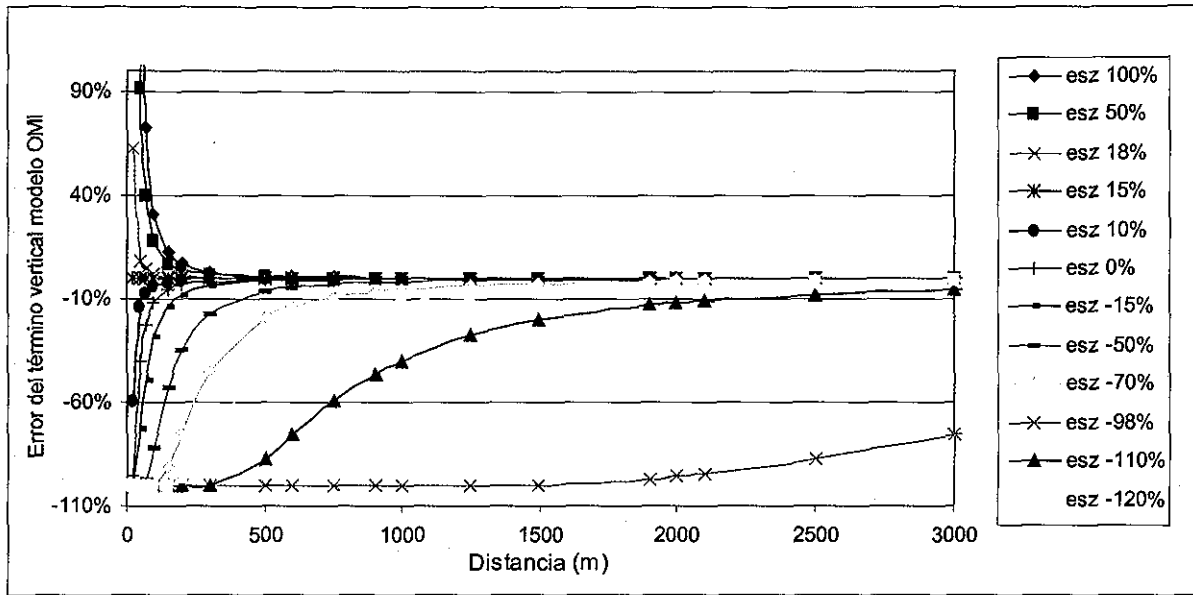


Figura 4.6 Comportamiento del término vertical para el modelo OML con  $\varepsilon_L = 30\%$   $\varepsilon_{h_e} = 15\%$ .

El término vertical presentó una indeterminación cuando el error del coeficiente de dispersión vertical se subestima con  $-100\%$ . Propagando un error de  $-100\%$ . Del análisis del término vertical, se recomienda sobreestimar el error del coeficiente de dispersión vertical.

#### 4.1.3.3. ISCST3

El comportamiento del término vertical del modelo ISCST3 (expresión 4.5) se muestra en la figura 4.7.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

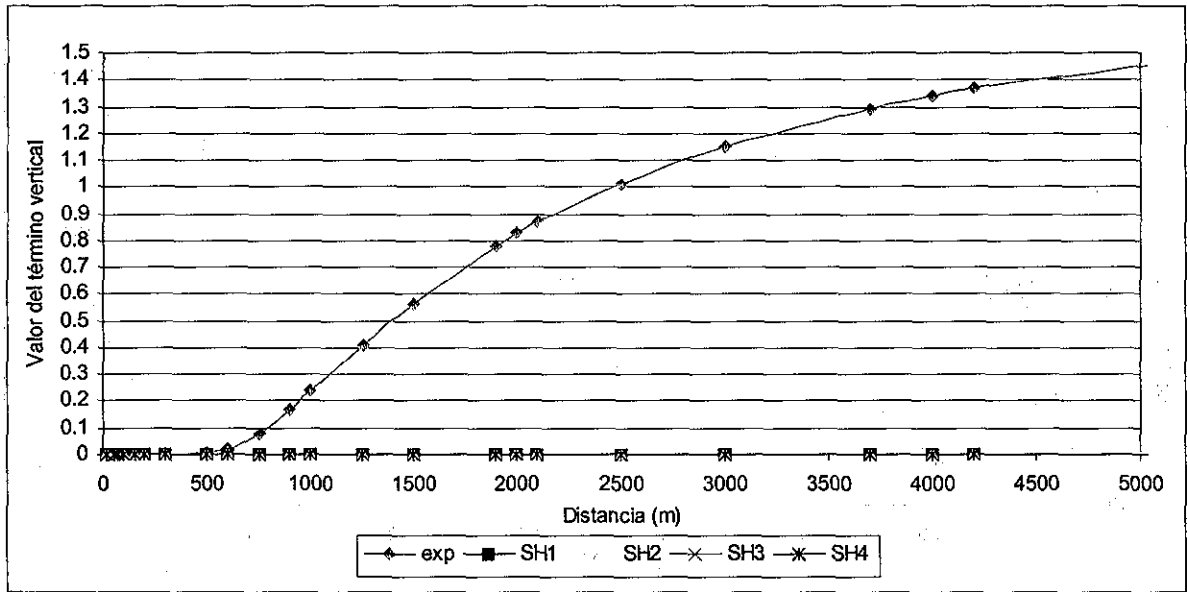


Figura 4.7 Comportamiento del término vertical modelo ISCST3.

La fórmula 3.7 describe la propagación de error a través del término vertical, que considera  $H_1, H_2, H_3$  y  $H_4$  para representar diferentes fuentes que describen la reflexión de contaminantes.

La expresión 4.8 muestra el error relativo para  $H_1$ , las expresiones de error para las  $H_2, H_3$  y  $H_4$  son similares.

$$\varepsilon_{H_1} = \frac{\left(1 + \frac{-\left(2iz_i \varepsilon_{z_i} - h_e \cdot \varepsilon_{h_e}\right)}{z_r - \left(2iz_i - h_e\right)}\right)^2}{\left(1 + \varepsilon_{\sigma_z}\right)^2} \quad (4.8)$$

La expresión 4.8 se indetermina para errores de  $-100\%$  del coeficiente de dispersión vertical. Por lo que se consideraron cuatro diferentes casos para el estudio de propagación de error.

Tabla 4.5 Casos de estudio del término vertical modelo ISCST3.

Caso	Valor de $\frac{\left(1 + \frac{-\left(2iz_i \varepsilon_{z_i} - h_e \cdot \varepsilon_{h_e}\right)}{z_r - \left(2iz_i - h_e\right)}\right)^2}{\left(1 + \varepsilon_{\sigma_z}\right)^2}$	Error del término vertical del modelo ISC3
1	$>1$	Negativo
2	$=1$	Tiende a cero



3	<1	Positivo
4	$\varepsilon_{\sigma_z} = -100\%$	Indeterminado

Cuando el error del coeficiente de dispersión vertical es mayor que el error de la altura de capa de mezcla el valor de la expresión 4.8 se vuelve negativo, generando una propagación positiva de error. El caso cuando los errores son iguales, estos compiten dando un valor para el término de cero.

Se propaga un error negativo, cuando el error del coeficiente de dispersión es menor que el error de la altura de capa de mezcla. También se estudio el comportamiento para diferentes errores del coeficiente de dispersión vertical, el comportamiento se observa en la siguiente figura.

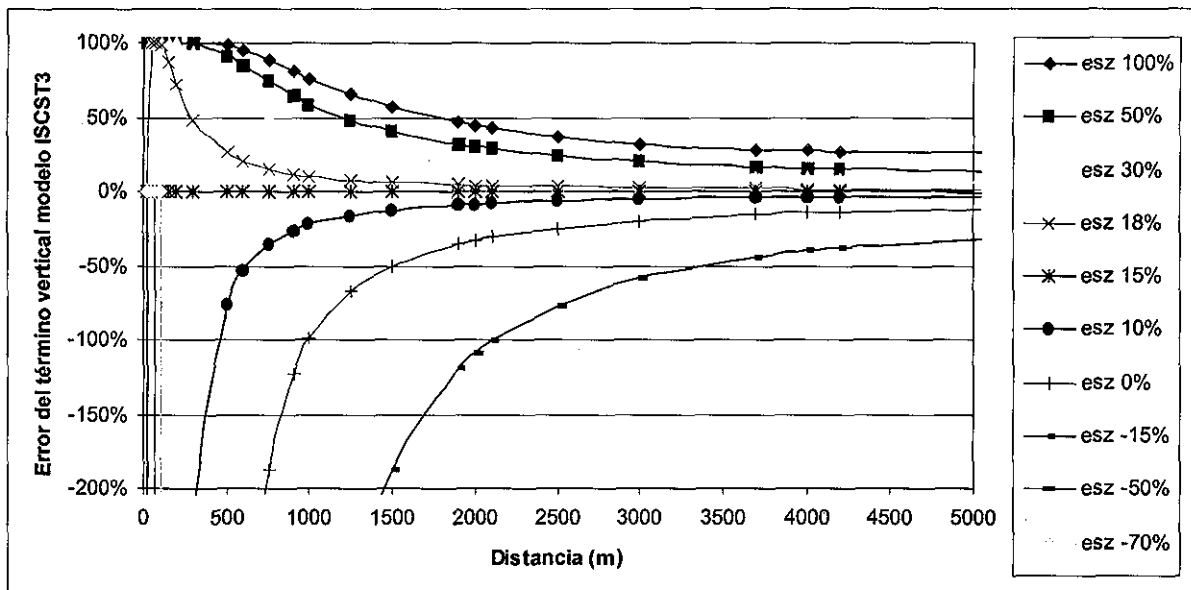


Figura 4.8 Error del término vertical modelo ISCST3 con  $\varepsilon_{z_1} = 30\%$   $\varepsilon_{h_c} = 15\%$ .

## 4.2 Propagación de error a través de los diferentes modelos

En esta sección se analizan los modelos considerando simultáneamente los términos concentración, horizontal y vertical de cada modelo, empezando con el modelo IFDM, continuando con el modelo OML y finalizando con el modelo ISCST3.

### 4.2.1 Modelo IFDM

Se analiza el modelo IFDM considerando los valores de la tabla 2.11 y los errores de la tabla 3.3. El comportamiento del modelo se muestra en la figura 4.9.

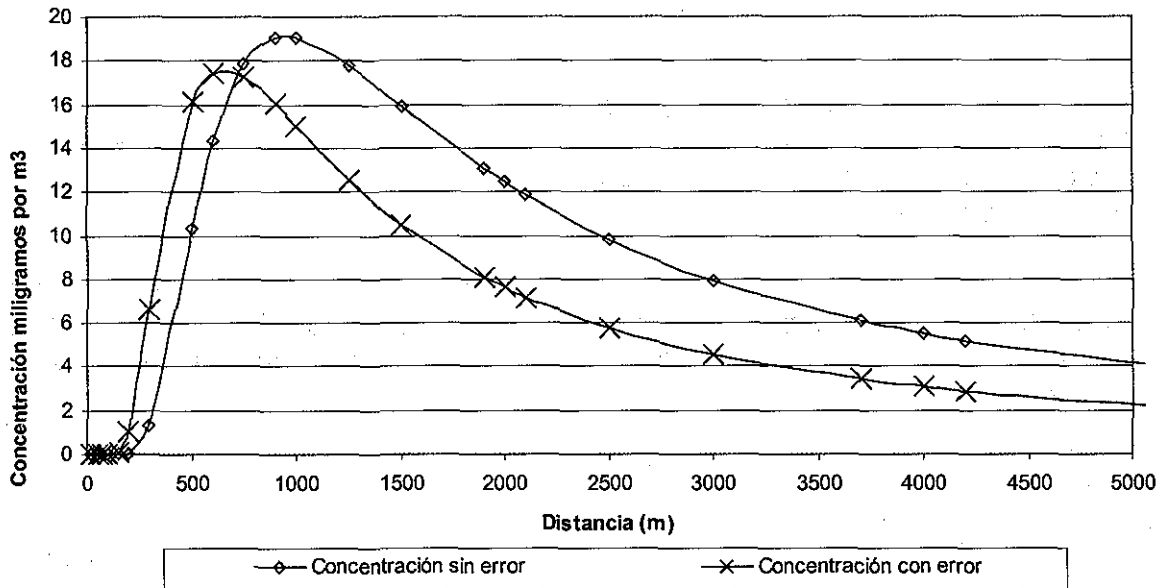


Figura 4.9 Concentración estimada con y sin error modelo IFDM con  $\varepsilon_{\sigma_s} = 50\%$ .

El modelo IFDM presenta subestimación de la concentración al considerar sobrestimación de  $\varepsilon_{\sigma_s} = 50\%$  en los coeficientes de dispersión.

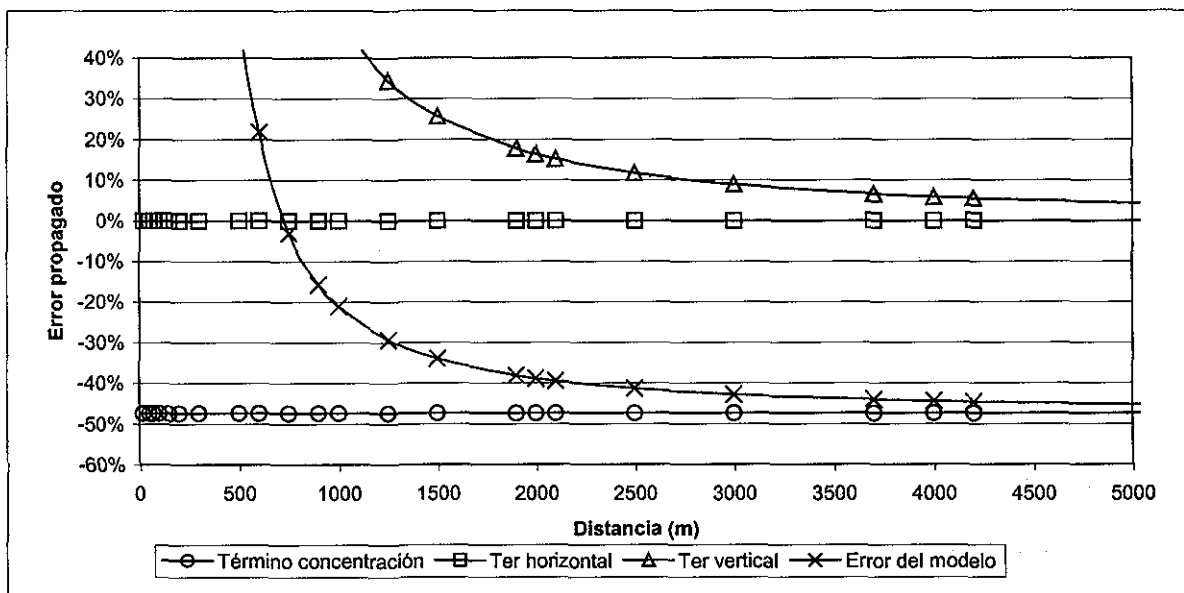


Figura 4.10 Contribución al error debido a los términos modelo IFDM con  $\varepsilon_{\sigma} = 50\%$ .





El error que propaga el modelo IFDM, es la contribución del error de cada término. A distancias menores de 2,000 metros la mayor contribución es debida al término vertical. Mientras que a distancias mayores el modelo tiende a igualar el error del término concentración.

Un segundo análisis considera una subestimación de  $\varepsilon_{\sigma_s} = -50\%$  para los coeficientes de dispersión, manteniendo constantes los errores y valores de las demás variables, el comportamiento se muestra en la figura 4.11

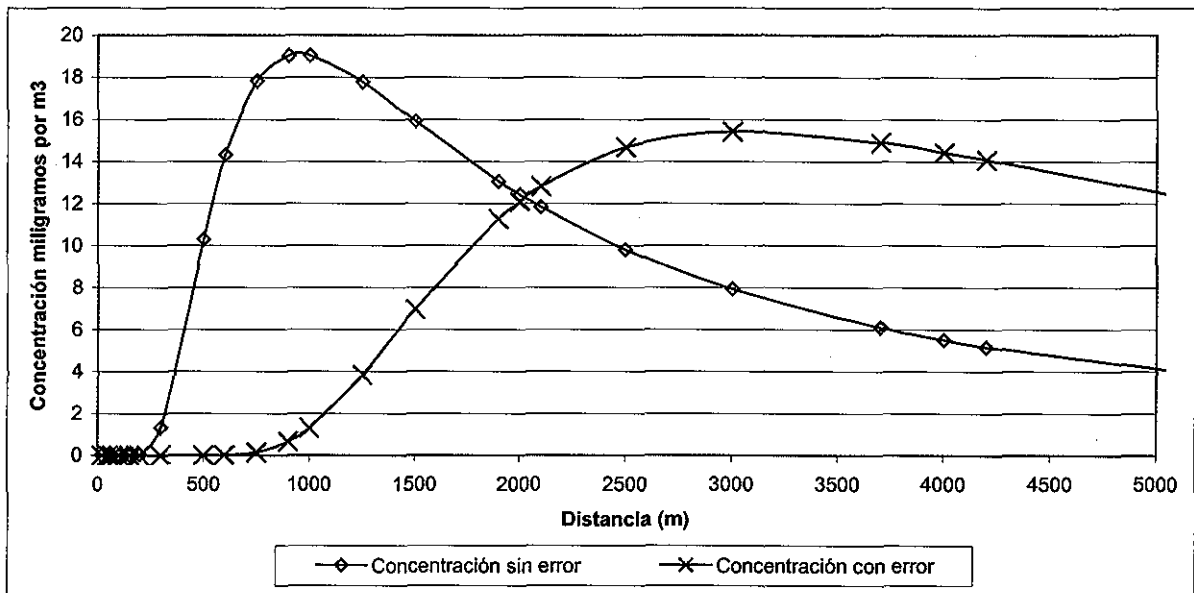


Figura 4.11 Concentración estimada con y sin error modelo IFDM con  $\varepsilon_{\sigma_s} = -50\%$ .

El modelo sobrestimo la concentración al considerar el error de  $\varepsilon_{\sigma_s} = -50\%$  en los coeficientes de dispersión a distancias mayores de 2,500 metros. El término concentración propaga un error de 370%, mientras que el término horizontal no propaga error, el término vertical generó un error que va de -100% para distancias menores de 500 metros, que aumentó con la distancia a un valor de -32% a una distancia de 5,000 metros, como se muestra en la figura 4.12.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

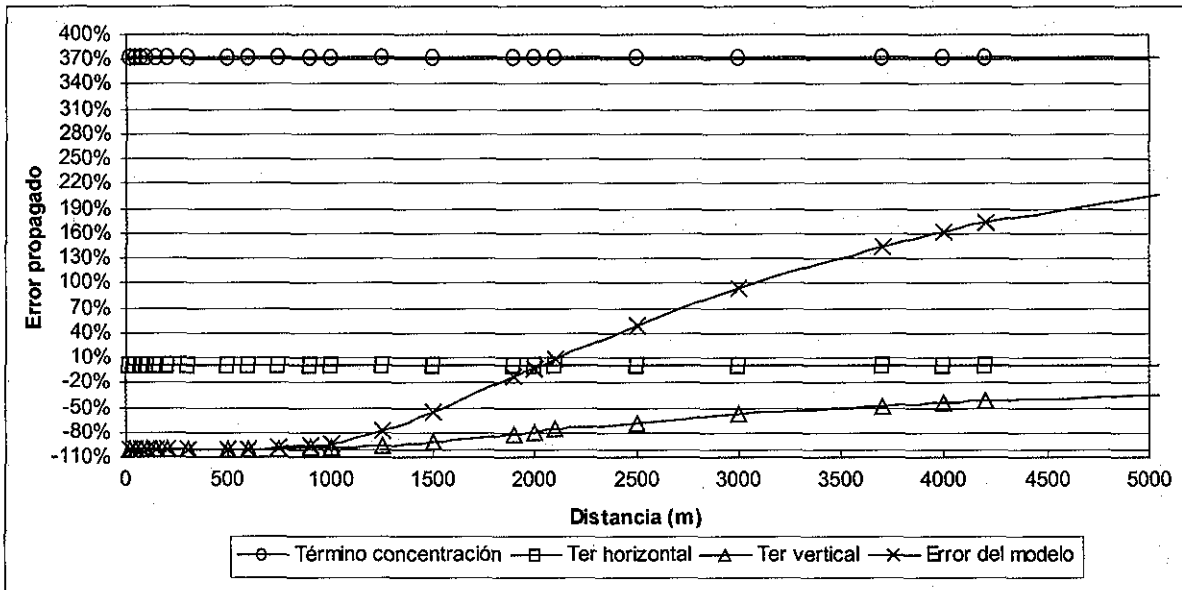


Figura 4.12 Contribución por términos al error del modelo IFDM con  $\varepsilon_{\sigma} = -50\%$ .

El comportamiento del modelo se muestra muy sensible a la variación de error en los coeficientes de dispersión, el error del modelo se propagó de forma inversa al error de los coeficientes de dispersión. Es importante hacer notar el caso donde los errores de los coeficientes de dispersión son  $-100\%$ , ya que el modelo se indetermina propagando un error límite de  $-100\%$  para todas las distancias.

#### 4.2.2 Modelo OML

Se considera la sobrestimación del error con  $50\%$  para los coeficientes de dispersión y otro segundo caso donde se subestiman con  $-50\%$ . El comportamiento del primer caso se muestra en la figura 4.13.

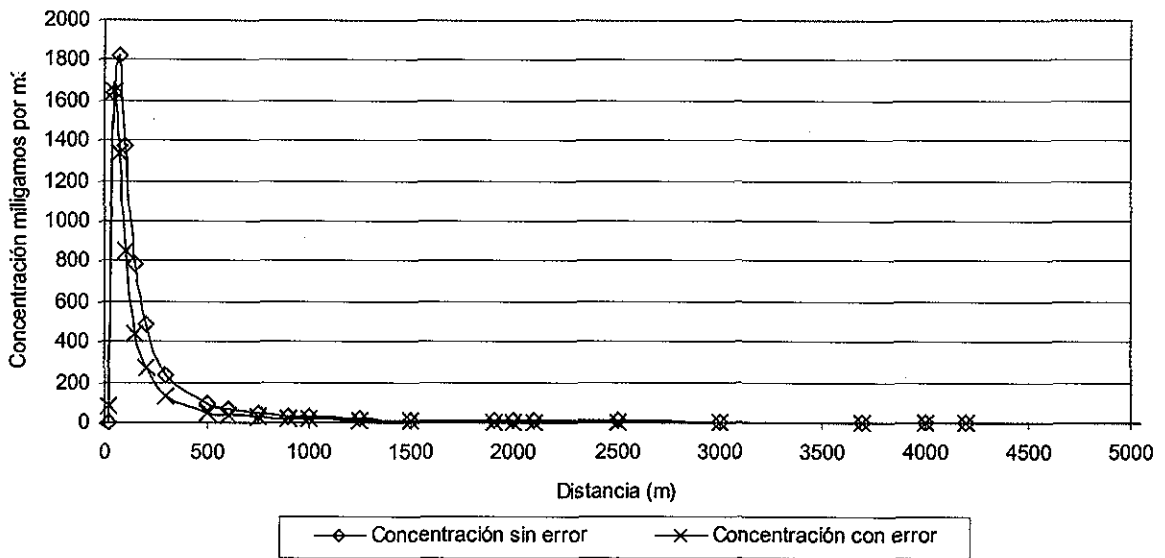


Figura 4.13 Concentración estimada con y sin error modelo OML con  $\varepsilon_{\sigma_s} = 50\%$ .

El modelo subestima la concentración al considerar un error de  $\varepsilon_{\sigma_s} = 50\%$  en los coeficientes de dispersión.

El término concentración propaga un error de -47%, mientras que el término horizontal no propaga error, el término vertical generó un error mayor de 100% para distancias menores de 2,000 metros, que disminuyó con la distancia, como se muestra en la figura 4.14.

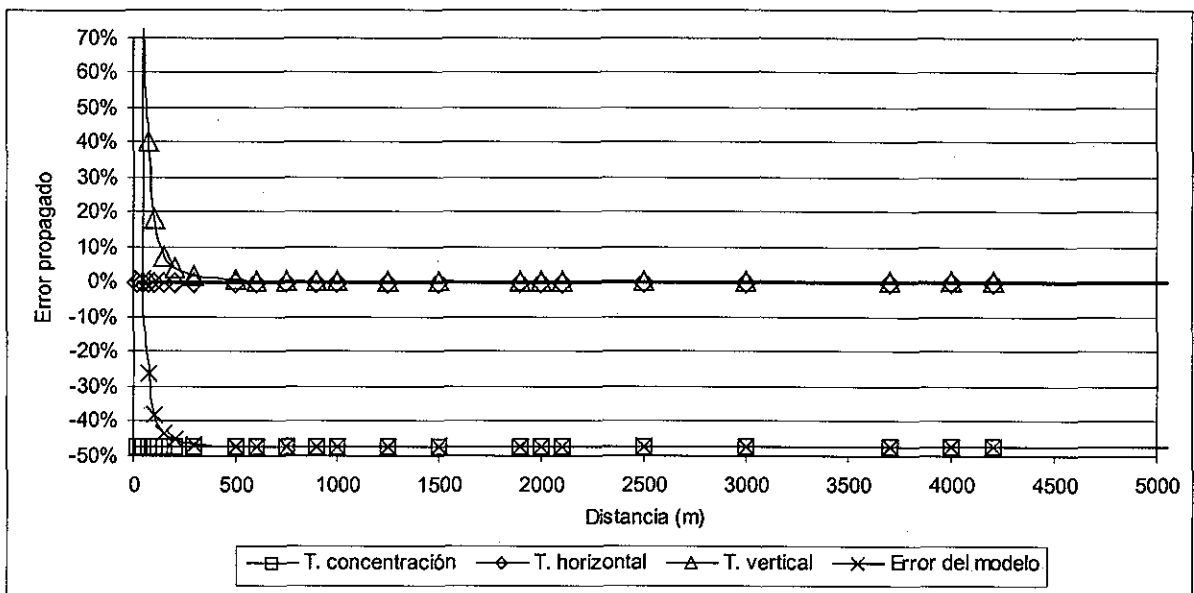


Figura 4.14 Contribución al error del modelo OML debido a los diferentes términos con  $\varepsilon_{\sigma} = 50\%$ .

El comportamiento encontrado al subestimar con  $\varepsilon_{\sigma's} = -50\%$  los coeficientes de dispersión, se muestra en la figura 4.15

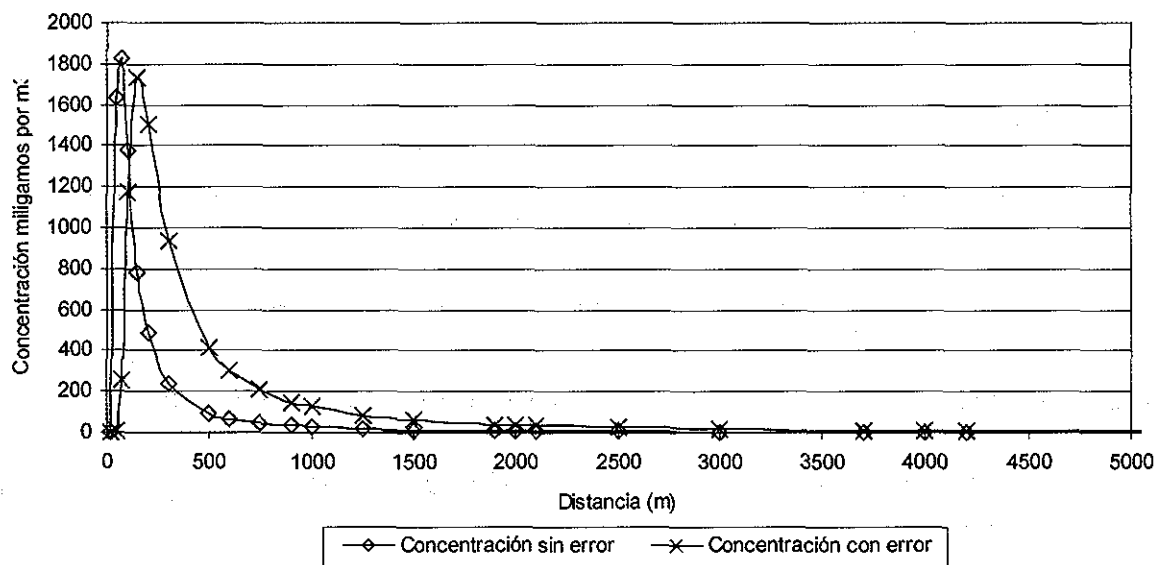


Figura 4.15 Concentración estimada con y sin error modelo OML con  $\varepsilon_{\sigma's} = -50\%$ .

El modelo sobrestimo la concentración al considerar un error de  $\varepsilon_{\sigma's} = -50\%$  en los coeficientes de dispersión. El término concentración propaga un error de 370%, mientras que el término horizontal no propaga error, como se muestra en la figura 4.16.

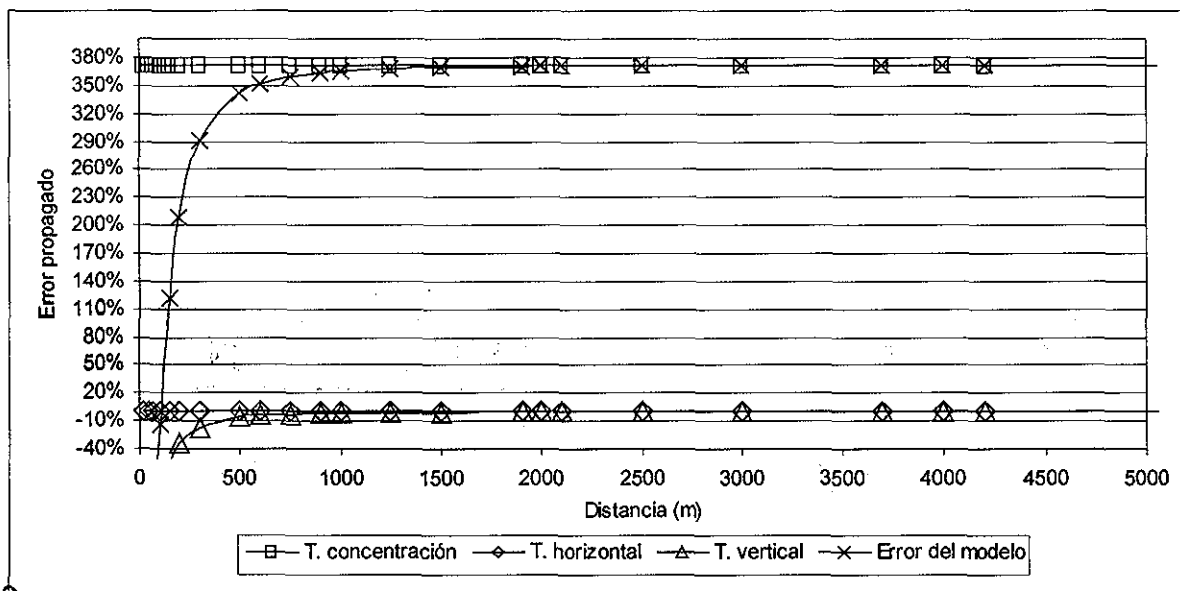


Figura 4.16 Contribución al error del modelo OML debido a los diferentes términos con  $\varepsilon_{\sigma} = -50\%$ .

### 4.2.3 Modelo ISCST3

En la siguiente gráfica se muestra la concentración del modelo, al considerar una sobrestimación del 50% en los coeficientes de dispersión

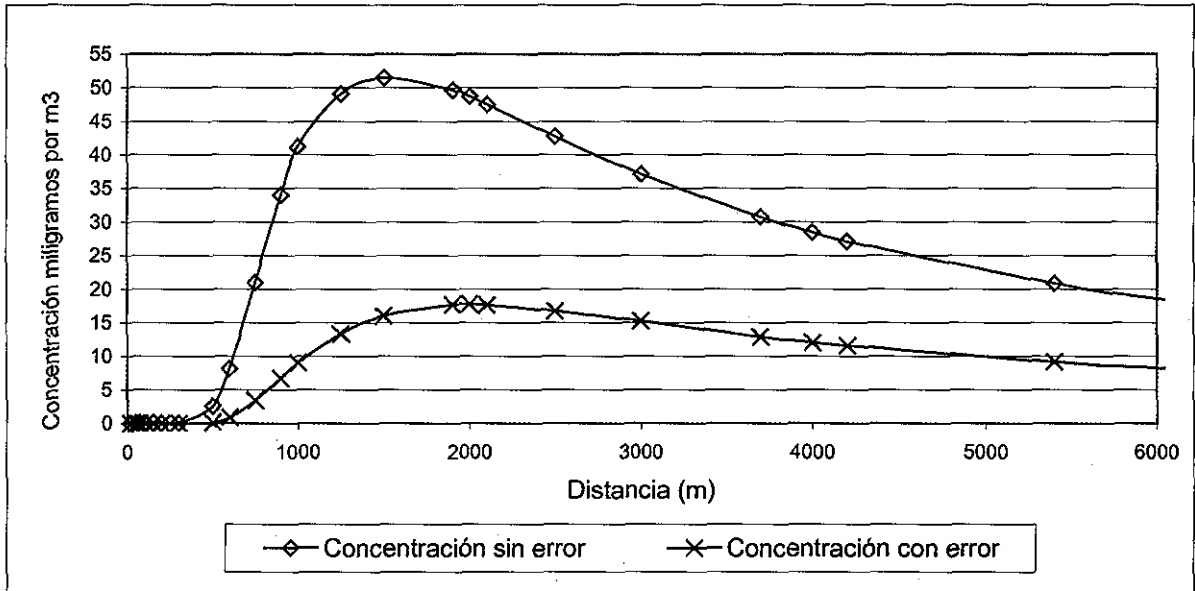


Figura 4.17 Concentración estimada con y sin error modelo ISCST3 con  $\varepsilon_{\sigma's} = 50\%$ .

El modelo ISCST3 presenta subestimación de la concentración al considerar sobrestimación de  $\varepsilon_{\sigma's} = 50\%$  para los coeficientes de dispersión.

Los errores propagados por cada término del modelo ISCST3 se muestran en la siguiente gráfica.

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

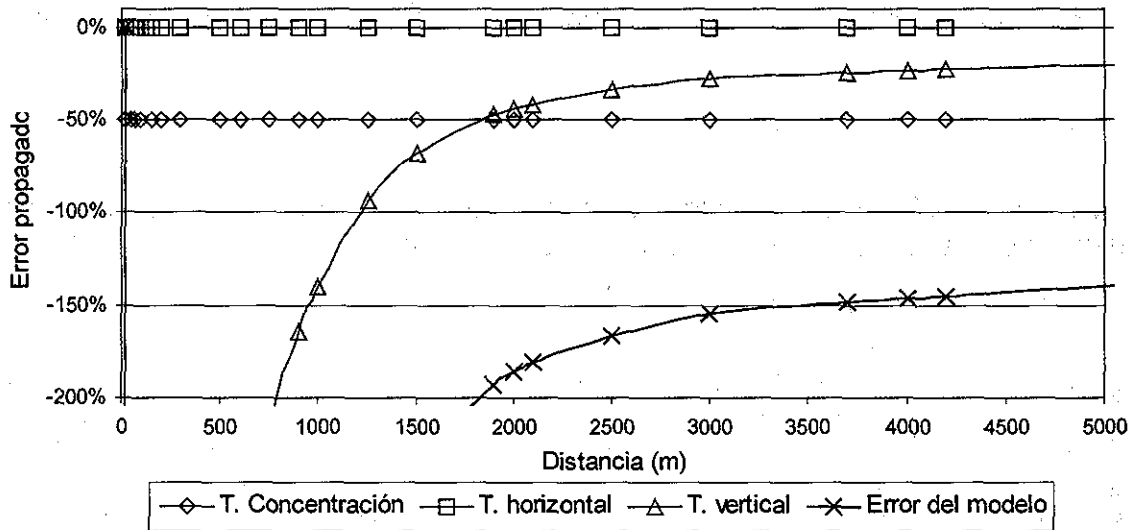


Figura 4.18 Error del modelo ISCST3 debido a los términos considerando  $\epsilon_{\sigma} = 50\%$ .

El error propagado por el modelo ISCST3, es la contribución debida al error de cada término. A distancias menores de 2,000 metros la mayor contribución es debida al término vertical.

Un segundo análisis considera la subestimación de  $\epsilon_{\sigma's} = -50\%$  para los coeficientes de dispersión, el comportamiento se muestra en la siguiente figura.

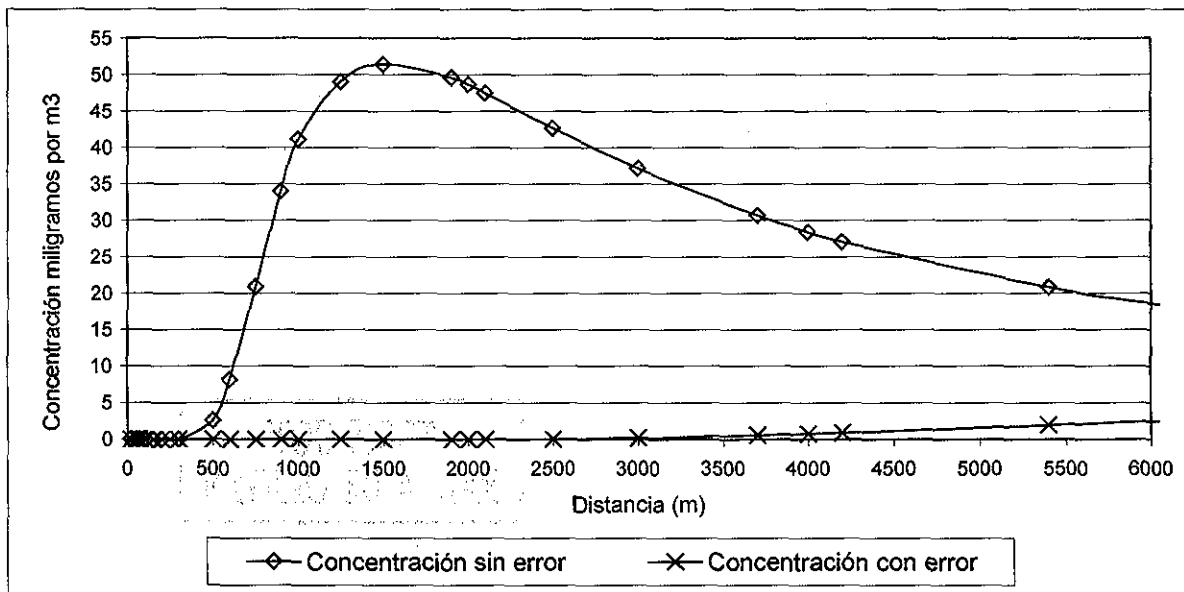


Figura 4.19 Concentración estimada con (sin) error modelo ISC3 con  $\epsilon_{\sigma's} = -50\%$ .

El modelo subestima la concentración al considerar un error de  $\varepsilon_{\sigma_s} = -50\%$  en los coeficientes de dispersión. El término concentración propaga un error de 370%, mientras que el término horizontal no propaga error, mientras que el término vertical subestima el error, el comportamiento se muestra en la siguiente figura.

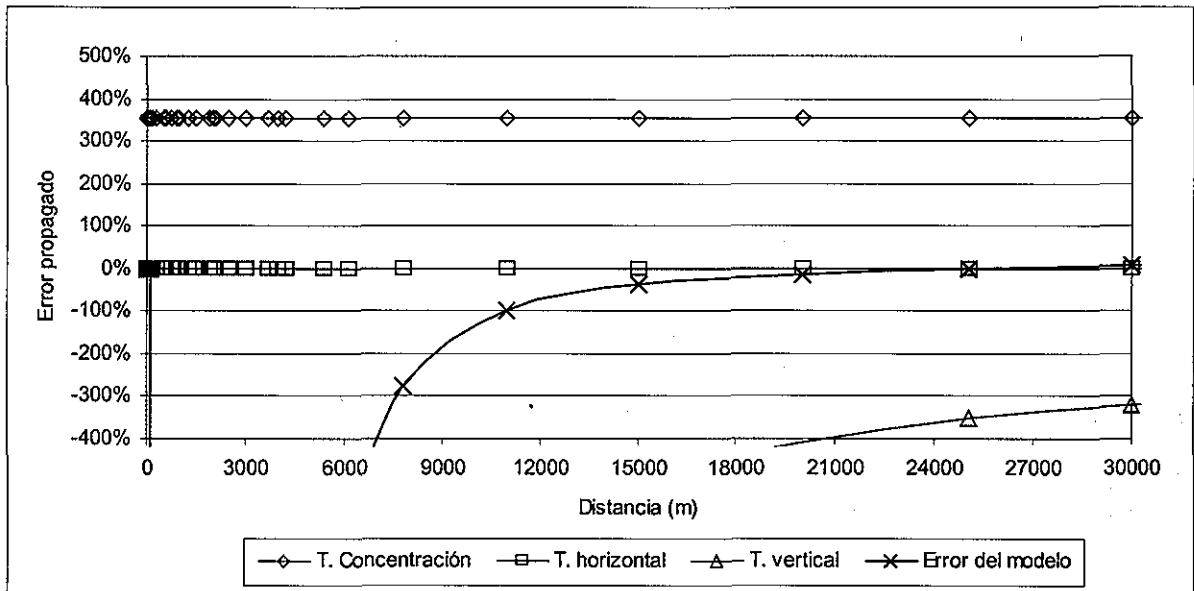


Figura 4.20 Contribución al error del modelo ISC3 debido a los diferentes términos con  $\varepsilon_{\sigma} = -50\%$ .

El comportamiento del modelo se muestra muy sensible a la variación de error en los coeficientes de dispersión, propagando un error negativo para los dos ejercicios.

### 4.3 Intercomparación de los modelos, con los datos Copenhague

En esta sección se presentan los resultados generados con datos del experimento Copenhague 1978-79. El experimento se realizó, en condiciones neutras y estables emitiendo ( $\text{SF}_6$ ) a una altura de 115 metros, monitoreándolo al nivel del suelo a distancias entre 2 y 6 Km. de la fuente. El experimento se realizó en los suburbios de Gladsaxe, latitud 55.735 N, longitud 12.494 E. El terreno se encuentra a 49 m sobre en nivel del mar. (Olesen, 1994).

Los datos meteorológicos y valores que considera el experimento de Copenhague son:

Tabla 4.6 Datos meteorológicos del experimento Copenhague.

Parámetro	Unidades	Valor
-----------	----------	-------

Q	g/s	3.2
u(115)	m/s	7.8
z <sub>i</sub>	m	1500
T <sub>g</sub>	K	286
T <sub>a</sub> (120)	K	285.1

Se compararon las concentraciones máximas generadas por los tres modelos, considerando un error relativo de  $\epsilon_{\sigma} = 50\%$  en los coeficientes de dispersión, estas son:

Tabla 4.7 Concentraciones máximas calculadas.

Modelo	Concentración máxima sin error	Distancia metros	Concentración máxima con error	Distancia metros
IFDM	1.510	3,000	1.467	2,000
OML	11.87	1,500	11.78	1,000
ISC3	1.038	11,000	1.254	5,400

Los tres modelos generaron comportamientos diferentes, como se muestra en la siguiente figura, adicionalmente se muestran los datos de campo del experimento, junto con una línea de tendencia para mostrar su comportamiento.

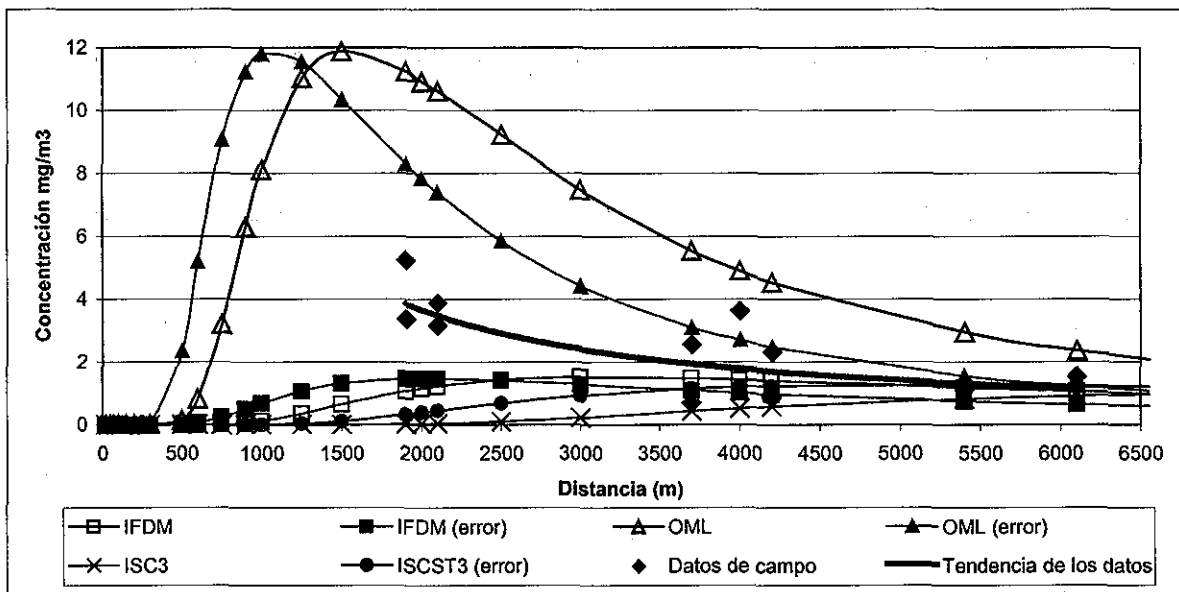


Figura 4.21 Concentración simulada por los modelos IFDM, OML e ISC3, para  $\epsilon_{\sigma_{x,y}} = 50\%$

El error propagado por los tres modelos es variable con respecto a la distancia, como se muestra en la siguiente figura.



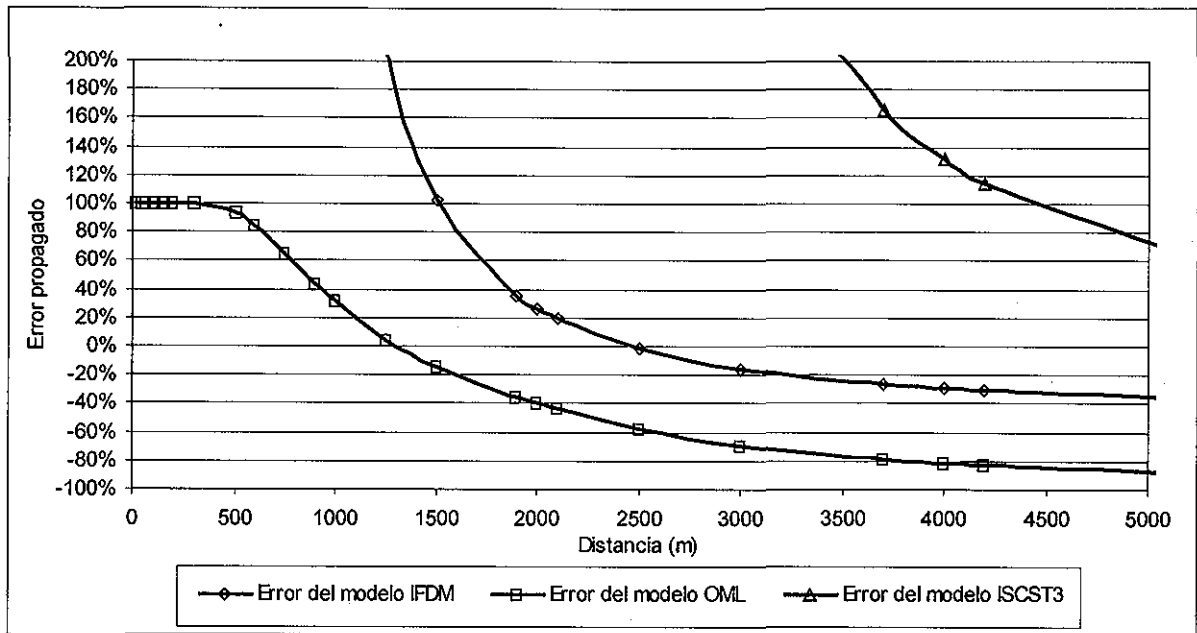


Figura 4.22 Error propagado por los modelos IFDM, OML e ISC3, para  $\varepsilon_{\sigma_{z,y}} = 50\%$

Un estudio similar pero considerando una subestimación de 50% en los coeficientes de dispersión, genera una mayor propagación de error a través de cada modelo, como se muestra en la siguiente figura.

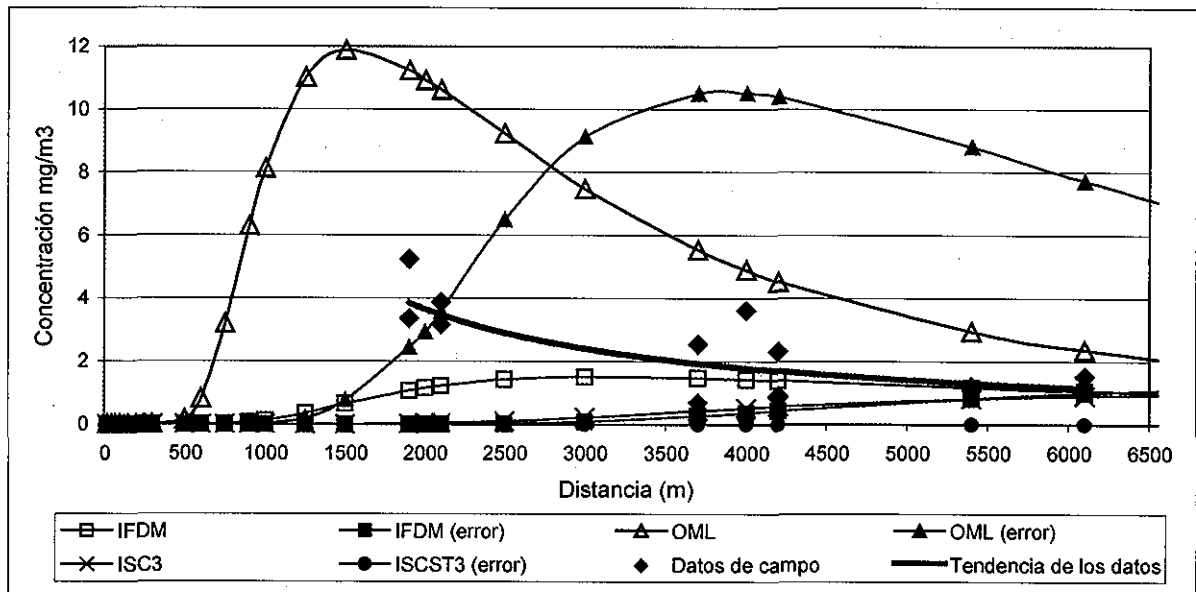


Figura 4.23 Concentración simulada por los modelos IFDM, OML e ISC3, para  $\varepsilon_{\sigma_{z,y}} = -50\%$

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Para este caso se subestimo el error como se muestra en la siguiente figura.

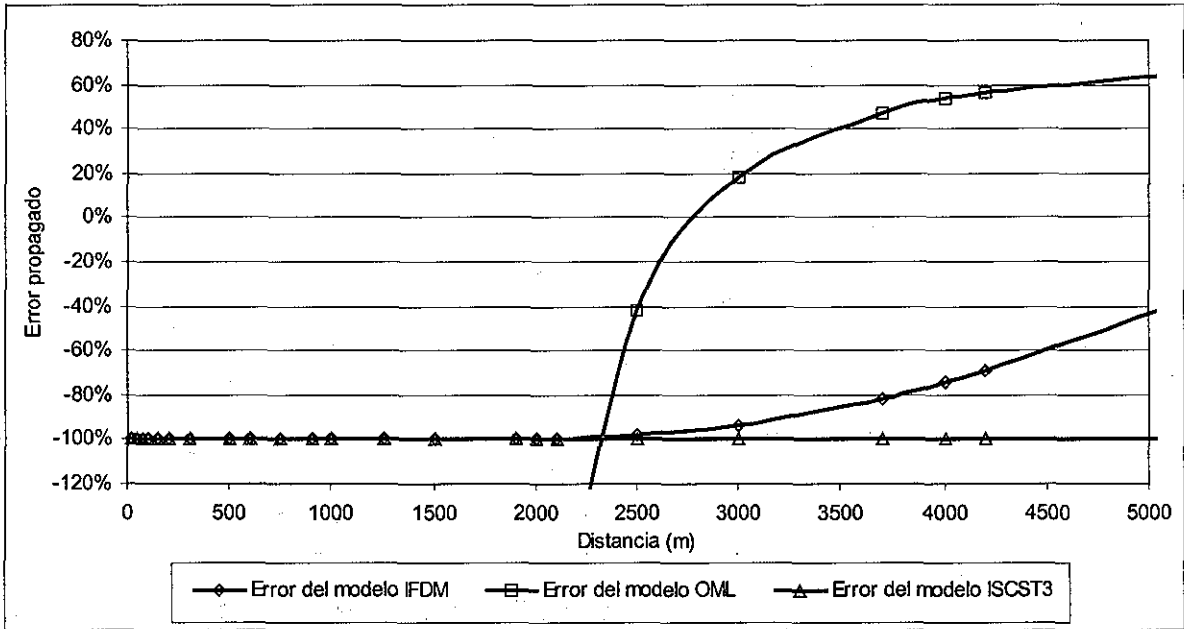


Figura 4.24 Error propagado por los modelos IFDM, OML e ISC3, para  $\varepsilon_{\sigma_{x,y}} = -50\%$

#### 4.4 Propagación del error a través de la evaluación estadística

En esta sección se analiza la propagación de error a través de los diferentes índices estadístico, empleando las fórmulas presentadas en la sección 3.3.3. considerando los datos meteorológicos, las concentraciones del monitoreo de campo y las estimaciones obtenidas por los diferentes modelos gaussianos (Anexo B). Se considero un error de 15% para los datos del monitoreo de campo.

El error propagado a través del promedio (fórmula 3.17), se indetermina cuando la suma de todas las concentraciones del monitoreo sea igual a cero.

Si el error de las estimaciones es constante, entonces el error de la media será el mismo que el error de cada estimación. Los errores propagados por los modelos son:

Tabla 4.8 Propagación de error a través del promedio.

Modelo	Valor del promedio	Error propagado por el modelo	Valor del promedio	Error propagado por el modelo
	a 2000 m		a 4000 m	
IFDM	1.463	27.14%	1.026	-28.43%
OML	7.836	-28.25%	2.763	-44.79%
ISCST3	0.388	1315.85%	1.186	135.69%

El error propagado a través del índice estadístico sesgo, con la fórmula 3.18 es:

Tabla 4.9 Valores de sesgo calculados.

Modelo	Valor del sesgo	Error propagado por el modelo	Valor del sesgo	Error propagado por el modelo
	a 2000 m		a 4000 m	
IFDM	3.026	9.93%	1.289	122.33%
OML	-3.348	-52.30%	-0.448	-85.02%
ISCST3	4.101	5.80%	1.128	-25.25%

El error propagado a través del índice estadístico sesgo fraccionado, empleando la fórmula 3.19 es una normalización del sesgo que sólo puede tomar valores entre -2 a 2., que genera los siguientes valores:

Tabla 4.10 Valores de sesgo fraccionado calculados.

Modelo	Valor del sesgo fraccionado	Error propagado por el modelo	Valor del sesgo fraccionado	Error propagado por el modelo
	a 2000 m		a 4000 m	
IFDM	1.017	-6.65%	0.772	129.35%
OML	-0.543	-42.63%	-0.177	-79.29%
ISCST3	1.682	-14.72%	0.645	-46.28%

El error propagado a través del índice estadístico desviación estándar, empleando la fórmula 3.20 se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 4.11 Valores de desviación estándar calculados.

Modelo	Valor de la desviación estándar	Error propagado por el modelo	Valor de la desviación estándar	Error propagado por el modelo
	a 2000 m		a 4000 m	
IFDM	0.002	-97.16%	0.054	58.13%
OML	0.446	45.45%	0.281	-38.27%
ISCST3	0.062	548.38%	0.037	-42.32%

El error propagado a través del índice estadístico de la desviación estándar fraccionada, empleando la fórmula 3.21, se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 4.12 Valores de desviación estándar fraccionada calculados.

Modelo	Valor de la desviación estándar fraccionada	Error propagado por el modelo	Valor de la desviación estándar fraccionada	Error propagado por el modelo
	a 2000 m		a 4000 m	
IFDM	1.991	20.71%	1.835	-2.33%
OML	0.702	-21.89%	1.267	54.39%
ISCST3	1.749	-10.45%	1.886	5.99%

El error propagado a través del índice estadístico correlación, empleando la fórmula 3.22, se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 4.13 Valores de correlación calculados.

Modelo	Valor de la correlación	Error propagado por el modelo	Valor de la correlación	Error propagado por el modelo
	a 2000 m		a 4000 m	
IFDM	-0.483	0.00%	-0.074	74.85%
OML	0.483	0.00%	-0.089	4.98%
ISCST3	-0.483	0.00%	0.156	61.28%

El error propagado a través del índice estadístico FA2, empleando la fórmula 3.23, se muestra en las siguientes tablas.

Este índice estadístico se aplica a cada juego de valores observación estimación, asegurando que los datos están entre la mitad y el doble de magnitud dependiendo de sus valores.

Tabla 4.14 Valores de error del FA2 calculados, modelo IFDM.

Distancia	Pi/Oi		Pix/Oix		ePi/Oi
2,000 m	0.3194	Fal	0.5115	ver	18.379%
	0.2053	Fal	0.3289	Fal	18.379%
	0.3898	Fal	0.5469	ver	3.716%
	0.3170	Fal	0.4449	Fal	3.716%
4,000 m	2.1493	fal	1.8696	ver	-35.706%
	0.5787	ver	0.5034	ver	-35.706%
	0.3955	Fal	0.3304	Fal	-38.261%
	1.5409	ver	1.2576	ver	-39.676%
	0.6025	ver	0.4918	Fal	-39.676%

Tabla 4.15 Valores de error del FA2 calculados, modelo OML.

Distancia	Pi/Oi		Pix/Oix		ePi/Oi
2,000 m	3.3417	fal	2.9000	fal	-35.859%
	2.1485	fal	1.8645	ver	-35.859%

	3.3677	fal	2.7584	fal	-39.460%
	2.7393	fal	2.2437	fal	-39.460%
4,000 m	8.0834	fal	5.3108	fal	-51.439%
	2.1765	fal	1.4300	ver	-51.439%
	1.3559	ver	0.8774	ver	-52.173%
	4.9959	fal	3.2057	fal	-52.573%
	1.9535	ver	1.2535	ver	-52.573%

Tabla 4.16 Valores de error del FA2 calculados, modelo ISCST3.

Distancia	Pi/Oi		Pix/Oix		$\epsilon$ Pi/Oi
2,000 m	0.0053	Fal	0.1140	Fal	1490.988%
	0.0034	Fal	0.0733	Fal	1490.988%
	0.0117	Fal	0.1680	Fal	958.042%
	0.0095	Fal	0.1367	Fal	958.042%
4,000 m	0.6262	ver	1.9624	ver	131.635%
	0.1686	Fal	0.5284	ver	131.635%
	0.1440	Fal	0.3914	Fal	100.909%
	0.6285	ver	1.5874	ver	86.690%
	0.2458	Fal	0.6207	ver	86.690%

El error propagado a través del índice error cuadrado medio normalizado, empleando la fórmula 3.24, se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 4.17 Valores de error cuadrado medio normalizado calculados.

Modelo	Valor del error cuadrado medio normalizado	Error propagado por el modelo	Valor del error cuadrado medio normalizado	Error propagado por el modelo
	a 2000 m		a 4000 m	
IFDM	1.526	-17.38%	1.365	158.22%
OML	0.337	-71.10%	0.298	-71.17%
ISCST3	10.188	-93.05%	1.029	-69.80%

Después de analizar el error propagado por cada uno de los índices estadísticos, es cuestionable el valor que cada índice presenta, y por lo tanto también es cuestionable la cualquier conclusión basada en los valores arrojados por los diferentes índices estadísticos.

El análisis de sensibilidad es un procedimiento que permite determinar el grado de influencia que tienen los cambios en los datos de entrada de un modelo matemático sobre los resultados obtenidos. Este tipo de análisis es especialmente útil en la toma de decisiones, ya que ayuda a identificar los factores que más afectan a los resultados y a evaluar el riesgo asociado a cada uno de ellos.

Existen dos tipos principales de análisis de sensibilidad: el análisis de sensibilidad local y el análisis de sensibilidad global.

El análisis de sensibilidad local se centra en estudiar el efecto de los cambios en un único parámetro de entrada sobre los resultados del modelo. Este tipo de análisis es útil para identificar los parámetros que más influyen en los resultados y para evaluar el riesgo asociado a cada uno de ellos. El análisis de sensibilidad global, por otro lado, estudia el efecto de los cambios en todos los parámetros de entrada del modelo. Este tipo de análisis es más complejo que el análisis de sensibilidad local, pero proporciona una visión más completa de la influencia de los diferentes parámetros en los resultados del modelo.

El análisis de sensibilidad puede realizarse de diferentes maneras, dependiendo del tipo de modelo que se esté utilizando.

En el caso de los modelos lineales, el análisis de sensibilidad puede realizarse mediante el uso de técnicas de programación lineal.

En el caso de los modelos no lineales, el análisis de sensibilidad puede realizarse mediante el uso de técnicas de simulación.

En el caso de los modelos de optimización, el análisis de sensibilidad puede realizarse mediante el uso de técnicas de optimización.

El análisis de sensibilidad es una herramienta muy útil para la toma de decisiones, ya que ayuda a identificar los factores que más afectan a los resultados y a evaluar el riesgo asociado a cada uno de ellos. Este tipo de análisis es especialmente útil en la toma de decisiones, ya que ayuda a identificar los factores que más afectan a los resultados y a evaluar el riesgo asociado a cada uno de ellos.

## 5. Conclusiones y recomendaciones

El estudio de la contaminación atmosférica requiere el desarrollo y aplicación de modelos capaces de describir y predecir el comportamiento de los contaminantes atmosféricos. Considerando que los modelos matemáticos, como cualquier otro modelo únicamente proporcionan una estimación de la concentración del contaminante y que dicha estimación depende de la calidad de los datos utilizados por los modelos.

De las variables estudiadas dentro de este trabajo, se encontró que los coeficientes de dispersión resultaron ser las variables que más afectaron para la propagación de error.

Dado que las metodologías para calcular los coeficientes de dispersión, son empíricas y diferentes para los tres modelos, resultaría de mucha utilidad que en un futuro se analicen de forma independiente estas metodologías para determinar de manera mas precisa la incertidumbre que contienen, por la limitación de tiempo y por no ser la finalidad de este trabajo no se estudiaron los fundamentos considerados para la elaboración de dichos coeficientes de dispersión.

Considerando que tradicionalmente el estudio de los modelos se realiza con métodos que operan como caja negra, introduciendo datos con un error predeterminado y comparándolos con los resultados sin estudiar la aportación al error por cada elemento de la expresión aritmética, en este trabajo se desarrollaron fórmulas analíticas que describen la propagación del error dentro de cada término de los modelos y a través de cada índice estadístico. Analizando la aportación de error por término y a través de los diferentes índices estadísticos.

El error propagado por el término concentración es constante siendo el resultado de la interacción entre el error de; la emisión, velocidad del viento y de los coeficientes de dispersión. El error de los coeficientes de dispersión, es el que propaga mayor error a través de este término.

Del análisis realizado al término concentración se recomienda trabajar sobreestimando el error de los coeficientes de dispersión, caso en el que se propagara menor cantidad de error a través del término.

El error propagado por el término horizontal (4.1.2) tiende a disminuir el error con la distancia, propagando mayor error a distancias cercanas a la fuente, donde las concentraciones del contaminante son pequeñas, el efecto de sobreestimar el error aplicado a una concentración tan pequeña puede dar valores de concentración que aún son difíciles de detectar por el monitoreo de campo, del análisis de la propagación del error se recomienda la sobreestimación del coeficiente de dispersión horizontal.

El error propagado a través del término vertical del modelo IFDM considera la relación que guardan los errores de la altura efectiva y el del coeficiente de dispersión vertical,

ya que de esta relación dependerá la magnitud positiva o negativa con la que se propagará el error del término, del análisis de la propagación de error se recomienda la sobreestimación del coeficiente de dispersión vertical.

El error del término vertical para el modelo OML tiende a disminuir el error con la distancia presentando un comportamiento directamente proporcional con el error del coeficiente de dispersión, esto quiere decir que mientras el error de la dispersión vertical se incrementó positivamente el error del término se incrementó, y en el caso donde disminuyó, el error del término también disminuyó, del análisis de la propagación del error se recomienda la sobreestimación de los coeficientes de dispersión vertical.

El error del término vertical para el modelo ISC3 tiende a disminuir del error con la distancia, del análisis de la propagación del error se recomienda la sobreestimación del coeficiente de dispersión vertical.

Los modelos IFDM y OML propagaron el error de los coeficientes de dispersión de manera inversa. Mientras que el modelo ISC3 subestimó el error propagado al sobre y subestimar el error de los coeficientes de dispersión.

El error propagado a través de los modelos, utilizando los datos del experimento Copenhagen involucro errores que van de -80% hasta 160%, al considerar una sobrestimación de 50% en los coeficientes de dispersión.

El error propagado a través de los índices estadísticos, varía tanto, que se puede dar el caso de tener un buen resultado en un determinado índice estadístico con un error tan grande. Que nos hace cuestionarnos sobre la manera de interpretar los resultados de los índices estadísticos.

Esta información es importante para el desarrollo de nuevos modelos que consideren el error de los datos y que logren tener un mejor desempeño al controlar la propagación del error.

Como principal recomendación se necesita promover la creación y utilización de un protocolo que compare las metodologías de cálculo para los parámetros y que estandarice la presentación de resultados, ya que en la actualidad las publicaciones que evalúan, comparan, estudian o reportan información sobre modelos, se presentan en formatos diferentes que dificultan la comparación y entendimiento.



*Bibliografía*

AMS (1980) American Meteorological Society A Summary of the AMS Workshop on Dispersion Model Performance, Woods Hole, Mass., 8-11 Bulletin American Meteorological Society

Barry, B. (1978) Errors in practical measurement in science, engineering and technology. Wiley Interscience publication. pp. 72-75

Berkowicz, R., Olesen, H.R. and Torp, U. (1986): The Danish Gaussian air pollution model (OML): Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications. In: Air Pollution Modeling and its Application V. C. De Wispelaere, F. A. Schiermeier, and N.V. Gillani (eds.). Plenum Press, New York.

Briggs (1971) Some recent analyses of plume rise observation", Proc. Second Internat'l. Clean Air Congress, Academic Press, New York

Briggs (1975) Plume rise predictions, Lectures on air pollution and environmental impact analysis. Workshop proceedings, Boston, Mass., Sept. 29- Oct. 3, pp. 59-111. American Meteorology Society, Boston, Mass

Briggs (1984) Plume rise and buoyancy effects, In: Atmospheric science and power production, ed.: D. Randerson, DOE/TIC 27601, Dep of commerce, springfield, USA.

Bultynck, H. and Malet, L. (1972) 'Evaluation of atmospheric dilution factors for effluents diffused from an elevated continuous point source', Tellus, No. 24, pp. 445-472.

Deardorff, J.W. (1972): Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers J.Atm.Sci. 29, 91-115

Deardorff, J.W. and Willis, J.E. (1984): Ground level concentration fluctuations from a buoyant and nonbuoyant source within a laboratory convectively mixed layer. Atm.Env. 18, 1297-1309

EPA (1995) -454/B-95-003b User's guide for the industrial source complex (isc3) dispersion models volume II - description of model algorithms

Erbrink, H., Tieben H. (1995) Application of different dispersion models to a site near the Belgian-Dutch border. Int J. Environment and Pollution, Vol. 5, Nos. 4-6 pp. 702-714.

Glynn, H. (1999) Ingeniería ambiental. Pretince Hall. cap. V,XIII

Hanna. S. R. (1988) Air quality model evaluation and uncentainty. JAPCA Vol.38 pp. 406-412.

Irwin, J. (1999) Statistical evaluation of centerline concentration estimates by atmospheric dispersion models Int. J. Environment and Pollution Vol. X,

Kent E. (1998) A statistical determination of the random observational errors present in voluntary observing ships meteorological reports, Journal of atmospheric and oceanic technology Vol. 16, No. 7, pp. 905-914.

Mathiesen, Ben 1997 Error propagation the tool of last resort, University of michigan [www.physics.lsa.umich.edu/IP-LABS/Errordocs/properr.html](http://www.physics.lsa.umich.edu/IP-LABS/Errordocs/properr.html)

Maes, G. (1995) Comparison of six Gaussian dispersion models used for regulatory purposes in different countries of the EU, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 5, Nos 4-6, pp. 734-747.

Memories of 6<sup>th</sup> Harmonisation Workshop (1999) Rouen France.

Montaño, P, A. 2000  
[http://www.people.virginia.edu/~am2zb/cursos/res\\_prob/modelos.htm](http://www.people.virginia.edu/~am2zb/cursos/res_prob/modelos.htm)

Moussiopoulos N. (1999) Uncertainty analysis of modelling studies included in air quality assessments, Memories of 6<sup>th</sup>harmo99, Rouen France.

NERI (1999) National Environmental Research Institute  
[http://www.dmu.dk/forside\\_en.asp](http://www.dmu.dk/forside_en.asp)

Olesen, H.R. (1994) Model validation kit for the workshop on operational short-range atmospheric dispersion models for environmental impact assessments in Europe, National Environmental Research Institute (NERI), Denmark.

Olesen, H.R. (2001) Ten years of Harmonisation activities: Past, present and future, National Environmental Research Institute (NERI), Denmark.

Pasquill-Gifford-Turner (1970) Workbook of atmospheric dispersion estimates", U.S. EPA Publication AP-26

Peixoto O. (1992) Physics of climate Springer-Verlag New York, Inc.

Seinfeld, J. (1978) Contaminación Atmosférica fundamentos físicos y químicos McGraw-Hill Inc.

Seinfeld, J. (1986) Atmospheric chemistry and physics of air pollution Wiley Interscience publication pg-495-504

Venkatram, A. (1999) Applying a framework for evaluating the Performance of air quality models, Memories of 6harmo99, Rouen France.

VITO (1993) Immissie Frequentie Distributie Model

Wark & Warner (1990) Contaminación del aire origen y control, Limusa cap 4.

Wellens, A. (2001) Comparison of the inherent data error in plume rise models, Int. J. Environmental and Pollution, in Press.

Willmott, C. (1981) On the validation of models Physical Geography 1981, 2, 2, pp 184-194

Zavodsky, D. (2000) Guidance on air pollution model Final Report Annex II

Internet:

URL 1. Environmental Expert com Software House: <http://www.environmental-center.com/software.htm>

URL 2. European Environment Agency <http://155.207.20.121/mds/search.php3>

URL 3. Institute for Climate Research: <http://www.geo.umnw.ethz.ch/>

URL 4. Laboratory of Heat Transfer and Environmental Engineering (LHTEE) <http://lhtee.meng.auth.gr/lhtee/>

URL 5. The UK National Air Quality Information Archive: <http://www.aeat.co.uk/netcen/airqual/index.html>

URL 6. The European Topic Centre on Air Quality (ETC-AQ home page: <http://www.etcaq.rivm.nl> ; model documentation centre: <http://aix.meng.auth.gr/lhtee/database.html>).

URL 7. United States Environmental Protection Agency Support Center for Regulatory Air Models: <http://www.epa.gov/>

URL 8. Model Validation Kit: [http://www.dmu.dk/AtmosphericEnvironment/harmoni/m\\_v\\_kit.htm](http://www.dmu.dk/AtmosphericEnvironment/harmoni/m_v_kit.htm)

URL 9. Montaña Pellegrini A. Julio 2000 [http://www.people.virginia.edu/~am2zb/cursos/res\\_prob/modelos.htm](http://www.people.virginia.edu/~am2zb/cursos/res_prob/modelos.htm)

*Bibliografía*

URL 10. CESGA Centro de supercomputación de Galicia  
<http://www.cesga.es/ca/defaultC.html>

**Anexo A. Tabla resumen de modelos de dispersión de contaminantes**

Nombre	tipo de modelo	Referencia	version	Año	Fuente	origen	aplicación	
1	IFDM	Gaussian	R. Cosemans J. Kretzschmar and G. Maes	NA	1992	EEA	Belgium	stack
2	PLUIMPLUS	Gaussian	Kleine Commissie Modellen	NA	1976	EEA	Nederland	stack
3	ISCST	Gaussian	EPA Trinity Consultants	NA		EEA	EPA USA	stack
4	AUSTAL 86	Gaussian	TA-LUFT	NA	1986	EEA	Germany	stack
5	OML	Gaussian	P. Lofstrom and H.R. Olesen	NA	1988	EEA	Denmark	stack
6	UK-ADMS	Gaussian Non-Gaussian in convective situations	Carruthers et al.	NA	1992	EEA	CERC and UK	stack
7	HPDM	Gaussian	Hanna and Paine	NA	1989	EEA	Sigma USA	stack
8	INPUFF	Gaussian puff trajectory	Petersen and Lavdas	NA	1986	EEA	EPA USA	stack
9	CTDMPLUS	Gaussian	EPA Perry et al	NA	1989	EEA	EPA USA	stack
10	SCALTURB	semi-gaussian Dispersion regions	Gryning, Holtslag Irwin and Sivertsen	NA	1987	EEA	(NILU), Norway	stack
11	CAR-FMI	Finite line source partly analytical Gaussian	Härkönen et al.	NA	1994	EEA	Finland	Road
12	ROADAIR	Finite line source, Gaussian traffic	Larssen and Torp	NA	1993	EEA	(NILU), Norway	Road
13	CONTILINK	Finite line source Gaussian, semi-stationary	Larssen et al.	NA	1993	EEA	(NILU), Norway	Road
14	ADMS-2	Three dimensional Quasi-Gaussian model	Anne McKeown	NA	1998	MDS	CERC and UK	assessment
15	ADMS-URBAN	Three dimensional Quasi-Gaussian model	Bill Oates	1.6		MDS	CERC and UK	road industrial and domestic
16	AEROPOL	Gaussian model, Pasquill stability classification	Marko Kaasik	1.2		MDS	ESFTO Aruka Ltd	inert pollutant dispersion
17	AUTOMOD	Three-dimensional, Eulerian, diagnostic local scale model				MDS		
18	BUO-FMI	Gaussian plume model and a gradient transfer (K-theory) model	Mr Juha Nikmo, Dr Jaakko Kukkonen	1.12	Mar-97	MDS	Finland	dispersion
19	DIPCOT	Three-dimensional, Lagrangian	NA	NA	NA	MDS	NA	NA
20	DISPERSION	Gaussian	Eva Marie Eriksson Gunnar Omstedt	"2.0"	Feb-98	MDS	Swedish	prediction industrial and urban
21	EK100W	Three dimensional Gaussian model	Wanda Pazdan	3.1	Mar-99	MDS	ATMOTERM Ltd	
22	EPISODE	Three-dimensional, combined Eulerian/Lagrangian air quality model	NA	NA	NA	MDS	NA	NA
23	HNS-COUNTRY	Single layer trajectory box model bi-Gaussian plume model	Dezso J. Szepesi Katalin E. Fekete	"2.0"	1993	MDS	Hungary	energy/emis sion scenario
24	HNS-ISAQA	Bi-Gaussian plume model applied on local scale	Dezso J. Szepesi Katalin E. Fekete 1997	"3.0"	Mar-97	MDS	Hungary	individual point
25	HNS-ROAD	Gaussian line source model up to 500 m from road	Dezso J. Szepesi Katalin E. Fekete 1998	"2.0"	1997	MDS	Hungary	EIA-s

FOR SALE  
DE LA BIBLIOTECA

Anexo A Tabla resumen de modelos de dispersión de contaminantes

Nombre	tipo de modelo	Referencia	version	Año	Fuente	origen	aplicación	
26	IMSM	Three-dimensional, Eulerian	NA	NA	NA	MDS	NA	NA
27	INPUFF-U	Lagrangian puff dispersion model	NA	NA	NA	MDS	NA	NA
28	KKW.LAG	Three-dimensional, Lagrangian	NA	NA	NA	MDS	NA	NA
29	MEMO	Three-dimensional, nonhydrostatic, prognostic mesoscale model	Prof. N. Moussiopoulos	"6.0"	Sep-97	MDS	(LHTEE)	mesoscale dispersion at the local-to-regional scale
30	MILORD	Lagrangian particle stochastic dispersion model	NA	NA	NA	MDS	NA	NA
31	MIMO	Three-dimensional, prognostic microscale model	Dr.-Ing. R. Kunz	"3.0"	Feb-98	MDS	(ITT)	microscale dispersion
32	MODIM	Straight-line, steady-state Gaussian plume model	Gabriel Szabó	"4.10"		MDS	Slovak	dispersion local-to-regional
33	MODLAC	Gaussian	Professor Carlos Borrego	96	Oct-96	MDS	Portugal	emergency planning
34	OML	Gaussian	H.R. Olesen	"4.2"		MDS	Denmark	stack
35	OND-86	Analytical formulae for calculation of 3D concentration fields	Eugene Genikhovich	NA	Feb-98	MDS	St. Petersburg, Russia	local-to-regional
36	ONM9440	Gaussian plume model for multiple sources	Mag. Gabriele Rau	NA	Nov-96	MDS	Austria	EIA-s
37	OPS	Lagrangian trajectory combined with a Gaussian	J.A. van Jaarsveld	"2.2"		MDS	NIPHE	Yearly average concentration
38	PLUME	Gaussian	Nelly Gromkova	ONE		MDS	Bulgary	dispersion local scale
39	PLUME-Plus	Gaussian	J. den Boeft	"1.1"		MDS	Netherlands	NA
40	POLGRAPH	Gaussian dispersion models	Professor Carlos Borrego	NA	1996	MDS	Portugal	NA
41	PPM	Gaussian puffs	Dr. Peter de Haan	"3.5"		MDS	Switzerland	risk assessment
42	PROKAS V	Gaussian	Dr. A. Lohmeyer	"5.2"	Feb-99	MDS	(Germany)	dispersion local scale
43	REMOTA	Three-dimensional, Eulerian				MDS		
44	SAFE AIR	Three-dimensional mesoscale model	Elisa Canepa	"1.2"	Mar-99	MDS	Italy USA	air motion pollutants
45	SEVEX	2-D Gaussian and a 3-D lagrangian particle ones	Mr. Georges VAN MALDER Dr. Alexis DUTRIEUX	"1.3a"		MDS	Ministere de l'Environnement - D.G.R.N.E.- D.P.P.G.S.S.	accidental release
46	SMOG	Lagrangian puff-model	NA	NA	NA	MDS	NA	NA
47	SPRAY	Lagrangian particle stochastic	NA	NA	NA	MDS	NA	NA
48	STACKS	Gaussian dispersion	Dr. J.J. Erbrink Ing R.D.A. Scholten	"4.1"	Nov-99	MDS	KEMA, Arnhem, NL	EIA-s
49	STOER.LAG	Three-dimensional, Lagrangian dispersion model	NA	NA	NA	MDS	NA	NA
50	SYMOS97	Gaussian plume model	Jiri Bubnik, Jan Macoun	"1.0"		MDS	Czech	Regulatory
51	UDM-FMI	Multiple source Gaussian plume model	Ari Karppinen	NA	Nov-97	MDS	(FMI) Finland	regulatory

NA No Aplica y/o no disponible  
 EEA European Environment Agency  
 MDS Model Documentation System

**Anexo B. Valores de monitoreo y generados por los modelos**

DIST (m)	Dato del	Estimación		
	Experimento	IFDM	OML	ISCST3
1900	3.360	1.07310	11.22826	0.01780
1900	5.226	1.07310	11.22826	0.01780
2100	3.152	1.22851	10.61498	0.03699
2100	3.875	1.22851	10.61498	0.03699
3700	0.685	1.47226	5.53714	0.42895
3700	2.544	1.47226	5.53714	0.42895
4000	3.613	1.42908	4.89887	0.52029
4200	0.906	1.39606	4.52626	0.56942
4200	2.317	1.39606	4.52626	0.56942
5400	1.203	1.17901	2.94133	0.80952
6100	1.520	1.06045	2.36086	0.90505

**Anexo B Valores de monitores y generados por los modelos**