

# METODOLOGÍA Y HERRAMIENTAS ÚTILES EN LA MODELIZACIÓN MULTIZONAL DE CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS

Salazar, E.; Ordieres, J.; Capuz, S.; Suárez, E.

## Abstract

This paper is based on the exhaustive revision of existing tools for the multizonal modelling of atmospheric pollutants. The study of the behaviour of spatial data of different kind of pollutants in the air needs a special analysis, reason why is presented into this work a proposal of methodology directed to the modelling of pollutants using geostatistical tools that have shown their capacity to predict effectively the highest concentrations of atmospheric pollutants at punctual geographical locations relatively far away of monitor stations.

*Keywords: prediction model, geostatistical, artificial intelligence, air pollutants, kriging.*

## Resumen

El trabajo que aquí se presenta esta basado en la revisión exhaustiva de herramientas existentes para el modelizado multizonal de contaminantes atmosféricos. El estudio del comportamiento de los datos espaciales de contaminantes presentes en el aire necesitan un análisis especial, por lo que se presenta una propuesta de metodología encaminada a la modelización de los mismos utilizando herramientas geoestadísticas que han mostrado su capacidad de predecir de manera eficaz las concentraciones máximas de contaminantes atmosféricos en una ubicación geográfica puntual y relativamente alejada de monitores.

*Palabras clave: modelo de predicción, geoestadística, inteligencia artificial, contaminantes en el aire, kriging.*

## 1. Introducción

Modelizar por medios matemáticos el comportamiento de los contaminantes atmosféricos representa una abstracción vía ecuaciones matemáticas de sistemas de una naturaleza muy compleja donde se interrelacionan un gran numero de variables aleatorias involucradas en el fenómeno que se busca simular.

La información que actualmente se conoce respecto a las concentraciones de dichos contaminantes confirman los impactos negativos al ambiente y la consecuente exposición humana a compuestos que afectan a su salud. Esta problemática va cada día en aumento principalmente en zonas urbanas donde la densidad demográfica es alta, sin excluir las áreas suburbanas circundantes.

Distintos países preocupados por la presencia de contaminación en el aire, instalan monitores que registran continuamente datos de contaminantes atmosféricos y de factores meteorológicos, buscan ubicar estos dispositivos en sitios estratégicos, pero generalmente la cantidad existente de ellos no es suficiente para tener un control multizonal.

Esto es razonable si tomamos en cuenta además, que cada uno de estos dispositivos representan costos considerables en instalación y mantenimiento lo que con frecuencia

imposibilita conocer la concentración de los contaminantes en una ubicación puntual dentro o fuera de la mancha urbana si no se localiza un monitor cercano.

La deficiencia anterior señalada se debe a que los niveles registrados por un monitor suelen perder representatividad espacial, especialmente si no se tiene estabilidad climatológica en el área ya sea por complejidades topográficas, de circulación atmosférica, o bien factores arquitectónicos que comprometan los patrones del flujo de los contaminantes atmosféricos.

En ciertos casos, los contaminantes quedan atrapados entre edificios, en zonas pequeñas, o por la topografía natural presente en el área, complementando la problemática los factores desfavorables de inestabilidad meteorológica de vientos, temperatura o humedad. Estas características particulares incrementan la posibilidad de impactar en la salud de ocupantes de los edificios del área o de personas que caminan por la zona. Este confinamiento de contaminantes demanda una atención particular en políticas ambientales dados los altos riesgos ambientales y en la salud pública.

Otro aspecto de la problemática tiene que ver, por ejemplo: con la emisión puntual de contaminantes de una fábrica en particular, donde la presencia de diversos factores como temperatura, el viento, su velocidad y dirección, entre otros, llegan a impactar en la calidad del aire de zonas considerablemente lejanas a su fuente debido a la dispersión y reacciones fotoquímicas.

La ausencia de un monitor en esa área, facilita que la problemática ambiental, al no ser registrada numéricamente, no se tenga evidencia y pase desapercibida como factor de efectos negativos en los cultivos y en general al ecosistema del área.

Por lo anterior, la integración de la información proporcionada por los monitores y los modelos de predicción multizonal se convierte en valioso apoyo para conformar una representación más completa y precisa de la realidad ya que participan en la evaluación de la calidad del aire aun en áreas que no están cubiertas por una red de monitoreo.

## **2. Objetivos**

Se busca proponer un marco referencial para el desarrollo de modelos de predicción multizonal de fenómenos ambientales que requieren tomar en cuenta la problemática de pérdida de representatividad espacial que presentan las mediciones de los monitores de la calidad del aire y que pueda servir en la predicción concentraciones en ubicaciones puntuales o de microescala.

## **3. Materiales y métodos**

### **3.1. Los modelos de calidad del aire**

Los modelos de calidad del aire son herramientas que utilizan algoritmos matemáticos para describir fenómenos que suceden en la naturaleza, facilitando su comprensión y control. Mediante análisis experimentales se verifica la adaptación de los modelos a los fenómenos reales de manera que permita reproducir de manera confiable el fenómeno modelado.

Existe una amplia variedad de modelos desarrollados para la abstracción del comportamiento de contaminantes atmosféricos, sus fundamentos básicos tienen naturalezas relacionadas con herramientas de regresión lineal multivariante, metodologías gaussianas, eulerianas, lagrangianas [1] y una serie de variantes o composiciones híbridas con otras metodologías modernas que buscan obtener resultados cada vez mejores en la modelización.

En cuanto a la contaminación atmosférica, esta cubre amplias escalas temporales y espaciales que van desde unos cuantos metros hasta miles de kilómetros y se han establecido distintas clasificaciones de acuerdo con las escalas espaciales que abarque el modelo de calidad del aire. En la Tabla 1, se esquematiza los tipos de modelo de calidad del aire de acuerdo a su escala y sus dominios, así como sus resoluciones típicas.

Modelo	Dominio típico	Resolución típica
Microescala	200 x 200 x 100 m	5 m
Mesoescala (urbano)	100 x 100 x 5 km	2 km
Regional	1000 x 1000 x 10 km	20 km
Sinóptico (continental)	3000 x 3000 x 20 km	80 km
Global	65 000 x 65 000 x 20 km	555 x 555 km

Tabla1. Clasificación de modelos de calidad de aire de acuerdo a su escala y sus dominios, así como sus resoluciones típicas

Existe una relación importante entre las escalas o amplitud de áreas o regiones que se busca modelizar y el método que más eficientemente se ajusta a esa escala predeterminada. El caso que nos ocupa busca concentrarse en herramientas y metodologías especializadas en modelización del comportamiento de los contaminantes atmosféricos en un punto geográfico determinado y que forma parte de una zona urbana o suburbana. Dicho de otra manera, este trabajo esta interesado en las metodologías y herramientas utilizadas para la modelización de contaminantes ambientales que abarquen un dominio típico urbano, pero que pueda determinarse de manera específica el nivel de contaminación a una resolución aproximada de 5m (micro escala).

### 3.2. Las metodologías y herramientas

Las metodologías actualmente usadas para la generalización matemática de contaminantes en el aire en un cierto territorio, están relacionadas con herramientas que conjuntan la información de una red de monitores que abarcan el área de interés con la aplicación de técnicas geoestadísticas [2], [3], aunque cada vez con mayor frecuencia se encuentran en la literatura aplicaciones híbridas [1], [2], [3], [4], [5] que buscan unir las ventajas y sobreponer las desventajas de una o varias metodologías.

Entre las herramientas más frecuentes están: Métodos geoestadísticos, Sistemas de información Geográfica (GIS), Kriging en sus distintos tipos, combinación bayesiana de kriging-regresión y frecuentemente combinaciones de métodos paramétricos y de inteligencia artificial [6] o bien metodologías que aplican variables enfocadas directamente a toma de decisiones de protección ambiental [7]. Existen también sofisticadas herramientas de software que se han desarrollado para aplicaciones específicas y un interesante caso de la utilización de FLUENT [8], el cual utiliza las corrientes de aire como fluido para el transporte de los contaminantes.

M.R. Cañada [9], desarrolló un estudio de la variabilidad espacial del ozono de la ciudad de Madrid, aplicando el método Kriging. Considera al ozono como una variable regionalizada y en el modelo desarrollado asume que la media local y que las varianzas de las diferencias calculadas para cada distancia son constantes.

El modelo Kriging, además de tener en cuenta la localización de los puntos observados (longitud / latitud), puede ser completado con el uso de covariables de interés, como pueden ser los datos meteorológicos: temperatura, viento, entre otros, además de orografía, estructura urbanística (altura edificios, anchura de las calles), etc.

De acuerdo al análisis de la literatura existente, se consideró de mayor utilidad el presentar un marco referencial para llevar a cabo la modelización vía herramientas geoestadísticas, por lo que se presenta la siguiente propuesta de metodología para su desarrollo.

#### **4. Metodología propuesta.**

##### **4.1. Etapa preliminar.**

Se sugiere desarrollar una revisión exhaustiva de información fidedigna relacionada con la problemática ambiental de la zona, determinar él o los contaminantes crítico(s) y caracterizar la región de interés.

Ya determinados él o los contaminantes de interés, es indispensable indagar respecto a las posibilidades de obtención de datos fiables, por lo que se recomienda conocer el número y tipo de monitores que registran datos con relación al contaminante y que sistema de verificación de la calidad de la información utilizan para validar los datos almacenados por los monitores.

Es indispensable también conocer las ubicaciones geográficas de dichos monitores para identificar la distribución espacial en la región de estudio lo que determinará la posible área que se podrá contemplar en el modelizado. También se debe determinar la cantidad y tipo de datos que hay disponibles relacionados con el fenómeno a modelizar como: información meteorológica, de contaminantes atmosféricos, precursores, continuidad o periodos de registro de los mismos (medias horarias son las usuales) y la cantidad de datos históricos con los que se puede contar. Así como también es importante conocer la ubicación, cantidad y tipos de fuentes de contaminación más importantes que hay en la zona, información topográfica y de arquitectura urbana, etc.

Lo anterior para asegurar que se tendrá disponible la información indispensable para descripción del fenómeno. Aunque también es importante reconocer que la cantidad y tipo de datos indispensables dependerá de los objetivos que se tengan dispuestos en el modelo y de la(s) técnica(s) que se utilizarán en la modelización. Si se busca modelizar un evento específico como por ejemplo: el comportamiento de los contaminantes debido a los incendios forestales del 2007 en California, la cantidad y tipo de datos diferirá de manera considerable a si se busca generalizar las concentraciones de ozono de una zona determinada de la ciudad.

Con la información contenida en el análisis preliminar, también se podrán delimitar de manera más realista los objetivos y aplicaciones buscados para el modelo.

##### **4.2. Explorar los datos disponibles.**

Cuando se piensa aplicar herramientas geoestadísticas, la exploración de los datos es una fase indispensable ya que su fundamento es la estimación y modelación de semivariogramas y estas son funciones aleatorias que estiman la correlación espacial del

fenómeno que se estudia. En principio es recomendable explorar los datos para detectar y tratar datos espurios (espaciales y distribucionales) para evitar influencias erróneas en el comportamiento real de los datos.

Desde el punto de vista de la estadística tradicional es necesario evaluar media, mediana, moda, varianza, desviación típica, correlación, regresión, rangos máximos, y mínimos, coeficiente de variación, simetría, curtosis; etcétera. Desde el punto de vista de la estadística espacial es importante calcular la autocorrelación espacial, centro de gravedad, tendencia (adireccional y direccional), análisis de formas, entre otras, lo que ayudará a conocer y manejar los datos adecuadamente en posteriores estudios.

También resulta útil el establecer pruebas de hipótesis de normalidad que verifiquen la simetría de los datos y que corroboren dicha hipótesis; o bien, para tener la pauta para la aplicación de la transformación que más convenga para la normalización de los mismos.

Lo anterior por que una buena estimación de un semivariograma debe presentar una distribución de probabilidad normal, sin tendencias, con una distribución espacial homogénea, robusta para datos espurios en la distribución y espacialmente. Conociendo las características de los datos permite la aplicación de medidas de ajuste y decidir los procedimientos adecuados de estimación espacial.

#### **4.3. Hacer un análisis estructural y establecer la función de correlación espacial.**

Como parte del análisis estructural (estudio variográfico), se busca conocer cómo la variable en estudio cambia de una localización a otra. En geoestadística ésta fase es fundamental; ya que se estima una función experimental que describa el grado de variabilidad y correlación espacial de los datos del fenómeno en estudio (estimación del semivariograma experimental) [10]. De acuerdo a las características obtenidas en el análisis estadístico de los datos se pudiera establecer una función de covarianzas si el fenómeno en estudio es estacionario de segundo orden o bien la función de semivarianzas cuando las diferencias son estacionarias en segundo orden.

Usualmente se estima un semivariograma experimental (variograma) para obtener la idea inicial de la variabilidad espacial de los datos. Se parte del supuesto de que se cumple con los requisitos de normalidad una vez realizados ajustes o pre-procesamientos de los datos (normalización) de acuerdo al paso anterior.

En esta fase es conveniente el análisis de la presencia de anisotropía para verificar si las características estructurales del fenómeno en estudio siguen alguna dirección determinada, lo cual sería favorable conocer y tomar en cuenta para el ajuste de modelo de dispersión de contaminantes en estudio.

Una forma rápida y práctica de visualizar la existencia de anisotropía es mediante el cálculo del "Mapa de Variogramas" [11], [12], [13] el cual además permitirá obtener la dirección inicial aproximada para el cálculo de los semivariogramas direccionales, permitiendo un análisis adecuado de anisotropía. Comúnmente se calculan variogramas en el orden desde  $0^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $135^\circ$  por ejemplo, hasta encontrar la dirección de máxima y mínima variabilidad.

##### **4.3.1. Establecer el Semivariograma experimental:**

Es importante tener claro que el semivariograma de ésta etapa no es utilizado para estimaciones, antes debe ser ajustado a uno a varios modelos teóricos (funciones analíticas) predefinidos que más caractericen la continuidad espacial de la variable atmosférica en estudio.

El variograma se define como la varianza de los incrementos de la variable regionalizada (contaminante de interés) en las localizaciones separadas una distancia  $h$ .

$$\text{Var}\{Z(x+h)-Z(x)\} = 2\gamma(h) \quad (2)$$

O bien, como la media aritmética de todos los cuadrados de las diferencias entre pares de valores experimentales  $Z(x)$  separados una distancia  $h$ , [14]. En este caso, la función  $\gamma(h)$  es denominada **semivariograma**, la cual puede ser obtenida de acuerdo a la ecuación siguiente:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N_p(h)} \sum_{i=1}^{N_p(h)} [Z(x_i) - Z(x_i + h)]^2 \quad (3)$$

donde:

$N_p(h)$  = Número de pares a la distancia  $h$ .

$h$  = incremento.

$Z(x_i)$  = Valores experimentales.

$x_i$  = localizaciones donde son medidos los valores  $z(x_i)$ .

Se sugiere revisar las referencias de algunos autores como Pannatier, [15] y Krajewski-Gibbs, [16] que plantean una serie de observaciones respecto a este punto.

#### 4.4. Ajustar semivariograma experimental. Modelar la función de correlación espacial

El ajuste de los modelos teóricos al semivariograma experimental, se realiza de forma visual-interactiva, variando los valores de los parámetros como  $C_0$  (efecto de Nugget) el cual representa la presencia de discontinuidad en el origen cuando  $C_0$  es mayor a cero, otro parámetro a medir es  $C + C_0$  (meseta) que representa al máximo valor de la variabilidad y el área de influencia de la correlación representada por:  $a$  (alcance) [17], hasta coincidir con los parámetros que mejor se ajustan. Vea Figura 1.

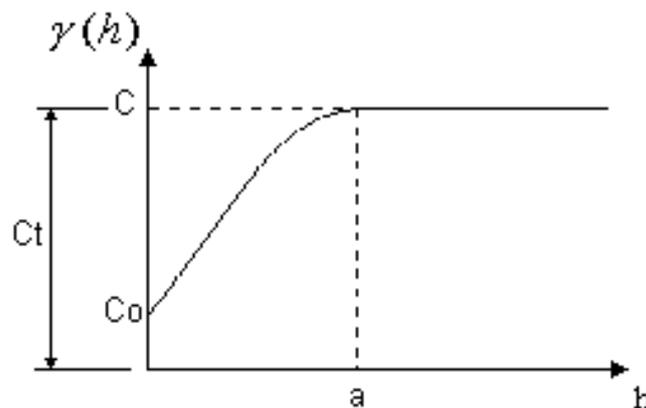


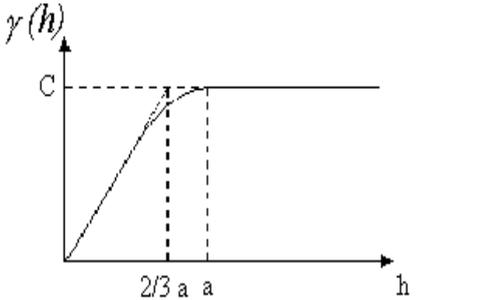
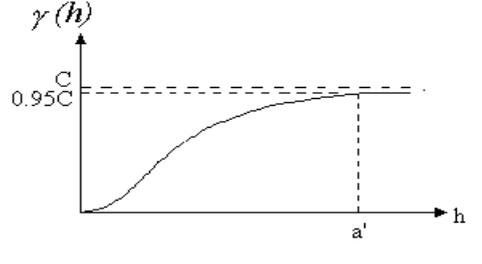
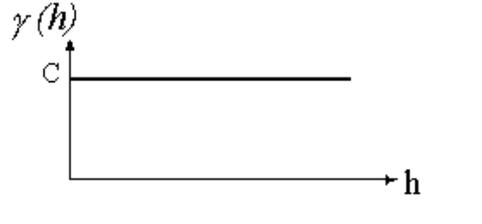
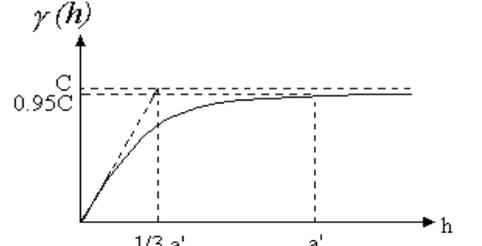
Figura 1. Parámetros principales del semivariograma

En ocasiones resulta útil efectuar ajustes polinomiales usando mínimos cuadrados u otras variantes, que aunque se encuentra el mejor ajuste, no siempre se verifica la condición de que el variograma obtenido sea siempre de tipo positivo, por lo que se recomienda el uso de modelos autorizados, éstos pueden revisarse de manera amplia en el manual de sistema geoestadístico Isatis, ya que aquí solo se presentan los más utilizados en modelización de contaminantes ambientales y estos son: el modelo esférico, el modelo gaussiano, el modelo exponencial, el modelo lineal. Sus ecuaciones y graficas

características se muestran en la Tabla 2, pero cabe mencionar que en la modelación de contaminantes como el ozono, el modelo más común es el modelo esférico.

Los modelos hacen referencia a los tres parámetros fundamentales: el alcance o radio de correlación espacial (a), la meseta (Ct) y la varianza pepita o nugget (Co). Aquí el proceso de modelación se reduce a determinar cuál modelo y con que parámetros se ajusta mejor a los valores estimados del variograma. El ajuste final del modelo generalmente es un proceso de “prueba y error”, modificando valores de los parámetros mencionados hasta encontrar el mejor ajuste.

El modelo de semivariograma seleccionado debe representar fielmente los aspectos importantes del semivariograma experimental [18], que serán usados posteriormente en el proceso de estimación o simulación.

<p>Modelo esférico</p> $\gamma(h) = C_0 + C_1 \left\{ \frac{3h}{2a} - \frac{1}{2} \left( \frac{h}{a} \right)^3 \right\} \text{ cuando } 0 < h < a$ $\gamma(h) = C_0 + C_1 \text{ cuando } h > a,$	
<p>Modelo gaussiano</p> $\gamma(h) = \begin{cases} C_0 + C_1 \left( 1 - e^{\left( \frac{-3h^2}{a^2} \right)} \right) & \text{Si } h > 0 \\ 0 & \text{Si } h = 0 \end{cases}$	
<p>Efecto Nugget</p> $\gamma(h) = \begin{cases} 0 & \text{Si } h = 0 \\ 1 & \text{En otro caso} \end{cases}$	
<p>Modelo exponencial</p> $\gamma(h) = \begin{cases} C_0 + C_1 \left( 1 - e^{\left( \frac{-3h}{a} \right)} \right) & \text{Si } h > 0 \\ 0 & \text{Si } h = 0 \end{cases}$	

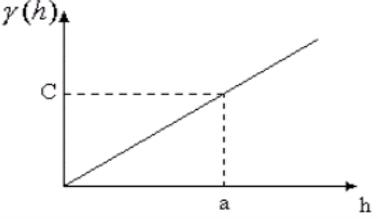
<p>Modelo Lineal</p> $\gamma(h) = (C/a)  h $	
--	--

Tabla 2. Modelos de semivariogramas más usuales.

El semivariograma por definición es nulo en el origen ( $C_0=0$ ), pero en la práctica las funciones obtenidas pueden presentar discontinuidad en el origen, a esta discontinuidad se le llama efecto de pepita (Nugget). Puede ser obtenido trazando una línea recta entre los primeros puntos del semivariograma empírico y extender ésta hasta que se intercepte con el eje Y. Si esta intersección ocurre por debajo de cero, el valor asumido por este efecto es cero, pues valores negativos de  $\gamma(0)$  no tienen significado y no es común. El efecto pepita se representa como  $C_0$ .

El valor de  $\gamma(h)$  para el cual con el aumento de  $h$  su valor permanece constante, se representa como ( $C_T = C + C_0$ ) y se denomina meseta. Puede obtenerse trazando una línea paralela a la abscisa y que se ajuste a los puntos de mayor valor del semivariograma y su valor se lee en la intersección de esta línea con la ordenada.

El alcance ( $a$ ) se puede definir cuando se llega a una distancia  $h$  para la cual las variables  $Z(x)$  y  $Z(x+h)$  son independientes. Esto representa que el semivariograma ha alcanzado la meseta. Lo anterior indica que se ha alcanzado la distancia para la cual los valores de la variable dejan de estar correlacionados.

#### 4.5. Validación del modelo de semivariograma

La operación de validar un modelo de semivariograma generalmente toma mucho tiempo. Hay que verificar que el ajuste del modelo teórico seleccionado estuvo acorde a las características del semivariograma experimental. Este se considera como el último de los pasos importantes del análisis de variabilidad. Una vez validado el modelo de semivariograma seleccionado y ajustado, éste será utilizado en la estimación por Kriging.

El método más ampliamente usado para ello es *Validación cruzada* [19]. Utilizado para evaluar el grado de bondad de un modelo de semivariograma y reconocido como un método óptimo de estimación de sus parámetros. Sencillamente consiste en sacar un elemento de la muestra y estimar el valor en ese punto con Kriging Ordinario empleando el modelo de variograma obtenido. De forma análoga se actúa para el resto de los elementos de la muestra. Como resultado se obtiene un mapa de las diferencias entre el valor real y el estimado de acuerdo a la ecuación que se muestra.

$$E(x_i) = Z^*(x_i) - Z(x_i) \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4)$$

$Z^*(x_i)$  = Valor estimado.

$Z(x_i)$  = Valor de la muestra.

Se analizan los residuos (diferencias) y se aplican de manera combinada los siguientes criterios:

- i. El valor medio de las diferencias (residuos) debe ser cercano a cero (M1)

$$M1 = (1/n) \sum_{i=1,n} [Z(x_i) - Z^*(x_i)] \quad (5)$$

- ii. El error medio cuadrado debe ser pequeño, dado por M2

$$M2 = (1/n) \sum_{i=1,n} [Z(x_i) - Z^*(x_i)]^2, \quad (6)$$

- iii.  $M3 = (1/n) \sum_{i=1,n} \{[Z(x_i) - Z^*(x_i)]/\sigma\}^2$ , debe ser igual a uno. (7)

- iv.  $M4 = \text{Corr}\{[Z(x_i) - Z^*(x_i)]/\sigma, Z^*(x_i)\}$ , debe ser cero. (8)

- v. La medida,  $M5 = \text{Corr}\{Z(x_i), Z^*(x_i)\}$ , debe ser uno. (9)

También es útil realizar un análisis sobre el comportamiento de la variabilidad del contaminante en estudio verificando la presencia de anisotropía, ya que las características de continuidad espacial del contaminante en estudio puede variar según la dirección que se analice, por lo que su comportamiento puede ser diferente en una dirección distinta a la estudiada, como se discute en Journel y Huijbregts [20], David [21], Zimmerman [22], Krajewski y Gibbs [16]. Se exige por este motivo un análisis del comportamiento de la continuidad espacial en distintas direcciones.

#### 4.7. Estimación espacial del contaminante en estudio. Aplicación de métodos de interpolación.

Existe un amplio número de métodos para interpolación, pero en el caso particular de interpolación dentro del contexto geoestadístico se recomienda el uso del método de Kriging ya que utiliza el análisis estructural de los datos y está considerado como el mejor estimador lineal insesgado [23]. A partir del conjunto de datos, proporciona el predictor lineal óptimo para la variable en estudio en una nueva posición espacial. Su filosofía es encontrar la mínima varianza del error en la estimación.

Y específicamente para la interpolación geográfica de contaminantes atmosféricos como es del interés de este estudio, se usa de manera frecuente el método de Kriging Ordinario, los modelos se establecen en las ecuaciones siguientes:

La metodología de Kriging consiste en efectuar una ponderación, es decir, atribuir un peso a cada valor observado, los pesos son calculados de manera que minimice la varianza de estimación resultante, teniendo en cuenta las características geométricas del problema [24]. Al minimizar la varianza de estimación se garantiza el uso óptimo de la información disponible [25].

##### En términos de la covarianza

Estimador:  $Z^*(v) = \sum \lambda_i Z(x_i)$  (11)

Sistema:  $\sum \lambda_i C(x_i, x_j) - \mu = C(x_j, v)$   $i, j = 1, \dots, n$  (12)

$$\sum \lambda_i = 1$$

Varianza del Kriging:  $\sigma^2 = C(v, v) - \sum \lambda_i C(x_i, v) + \mu$  (13)

##### En términos del semivariograma

Estimador:  $Z^*(v) = \sum \lambda_i Z(x_i)$  (14)

Sistema:  $\sum \lambda_i \gamma(x_i, x_j) + \mu = \gamma(x_j, v)$   $j = 1, \dots, n$  (15)

$$\sum \lambda_i = 1$$

Varianza del Kriging:  $\sigma^2 = \sum \lambda_i \gamma(x_i, v) - \gamma(v, v) + \mu$  (16)

En todos los casos el sistema puede ser escrito matricialmente de la forma:  $K \lambda = C$

El sistema kriging y la varianza de kriging dependen sólo del modelo estructural  $C(h)$  o  $\gamma(h)$  obtenido en pasos anteriores y de la geometría del soporte de observación., por lo que permite que la varianza de kriging sea usada convenientemente para el estudio de redes y clasificación.

#### **4.8. Análisis integral de los resultados de la estimación**

Una vez realizada la estimación del comportamiento espacial del fenómeno atmosférico, es importante estudiar la consistencia que presenta dicha estimación. Esto significa que los resultados deben reflejar de manera general el comportamiento esperado del contaminante estudiado según el conocimiento cualitativo que se tiene del mismo.

Hay que elaborar un modelo descriptivo (cualitativo) que expliquen la distribución actual estimada del contaminante. Revisar la presencia de zonas con alta incertidumbre, tomando en cuenta la consistencia de los datos y el modelo descriptivo y, usando los resultados de la estimación se pueden detectar las zonas de mayor incertidumbre (altos valores en la varianza de la estimación), lo cual permite mejorar en modelos de predicción por zonas que puedan presentar marcadas diferencias en sus características.

#### **5. Aspectos a observar durante y al final del desarrollo del modelo**

El principal objetivo de los modelos que aplican herramientas geoestadísticas, como es el caso que refiere este trabajo, es hacer estimaciones de valores desconocidos con la característica diferenciable (del resto herramientas de modelización) de que requiere de dos tipos de información conocida: (1) Un grupo de datos que caracterizan la variable a modelar, (2) La estructura espacial de los mismos.

Dichos datos y su estructura como se menciona en párrafos anteriores debe presentar atributos especiales como: anisotropía general, sin tendencias, ni efectos como proporcionalidad, entre otros, por lo que se recomienda revisar y aplicar (de ser necesario) las técnicas remediales sugeridas por Krajewski y Gibbs [16] para asegurar el buen desarrollo y desempeño del modelo.

#### **6. Conclusiones**

La formulación de modelos de predicción multizonal es una útil herramienta de apoyo para realizar predicciones de contaminantes en puntos específicos donde no hay monitores cercanos y presentan una problemática importante.

Las herramientas geoestadísticas y técnicas Kriging están siendo utilizadas al respecto y se busca aprovechar sus ventajas para combinarlo con otras herramientas con ventajas complementarias, por lo que cada vez es mas frecuente encontrar modelos híbridos que utilizan fundamentos geoestadísticos y herramientas de minería de datos e Inteligencia artificial.

El caso de utilización de fluent para la modelización de contaminantes en el aire también es un avance significativo respecto a la modelización multizonal por lo que seguramente se trabajará mayormente al respecto.

Pero es importante continuar trabajando en metodologías para determinar de manera eficaz los contaminantes en zonas críticas, por lo que en éste trabajo se planteó una metodología general enfocada a la aplicación específica de la geoestadística por que se ha considerado

como fundamental para los propósitos de modelización multizonal de contaminantes atmosféricos.

## Referencias

- [1] Caputo M., Giménez M., Felicelli S., Schlamp M. "Análisis Comparativo de Modelos de Dispersión de Contaminantes en la Atmósfera". XXVI Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología Nuclear .1999.
- [2] Bruce Denby & Michael Pochmann. "Basic data assimilation methods for use in urban air quality assesment". Proceedings of the 6<sup>th</sup> International Conference on Urban Air Quality". 2007.
- [3] M. Kavenski, R. Parkin, A. Podnukhov, V. Timonin, M. Maignan, V. Demyanov, S. Canu. "Environmental data mining and modeling based on machine learning algorithms and geostatistics" . Environmental Modeling and Software 19, (2004) 845-8455.
- [4] Shuiyuan Cheng, Dongsheng Chen, Jianbing Li, Haiyan Wang, Xiurui Guo. "The assessment of emissions-source contributions to air quality by using a coupled MM5-ARPS-CMAQ modeling system: A case study u=in the Beijing metropolitan region, China" . Environmental Modeling and Software 22, (2007) 1601-1616.
- [5] Ling L. Lim, Susan J. Hughes, Emma E. Hellowell. "Integrated decision support system for urban air quality assessment". Environmental Modeling and Software 20, (2005) 947-954.
- [6] Ranjeet S. Sokhi et. al. " An integrated multi-model approach for air quality assessment: Development and Evaluation of the OSCAR Air Quality assessment system". Environmental Modeling and Software 23, (2008) 268-281.
- [7] F. Costabile, I. Allegrini. " A new approach to link transport emissions and air quality : An intelligent transport system based on the control of traffic air pollution". Environmental Modeling and Software 23, (2008) 258-267.
- [8] S.Di Sabatino, R. Buccolieri, B. Pilvirenti, R.E. Britter. "Flow and pollutant dispersion in the street canyons using FLUENT and ADMS-Urban". Environmental Model Assessment. DOI 10.1007/s10666-007-9106-6. 2007. Springer Science.
- [9] M.R. Cañada T. Aplicación de la geoestadística al estudio de la variabilidad espacial del ozono en los veranos de la Comunidad de Madrid. Departamento de Geografía, Universidad Autónoma de Madrid. 2004
- [10] Armstrong, M. y Roth, C., 1997, Notas del curso Geoestadística Lineal, en el CFSG "Ciclo de Formación Especializada en Geoestadística", Curso: 1997-98, Centro de Geoestadística de la Escuela Nacional Superior de Minas de Paris, Fontainebleau, Francia.
- [11] Frykman, P. y Rogon, T.A., 1993, Anisotropy in Pore Networks Analysed with 2-D Autocorrelation (Variomaps), Computers & Geosciences, Vol. 19, No. 7, pp. 887-930.
- [12] Homand-Etienne, F., Belen, T., Sabbadini, S., Shtuka, A. y Royer, J.J., 1995, Analysis of the evolution of Rock Joints Morphology with 2-D autocorrelation (Variomaps), Application of Statistics and Probability, Lemaire, Favre and Mébarki (eds.), Balkema Rotterdam, pp. 1229-1236.
- [13] Isaaks & Co., 1999, SAGE2001, A Spatial and Geostatistical Environment for Variography, San Mateo, California, <http://www.isaaks.com>, 67 p.

- [14] Journel, A. G. y Huijbregts, C. J., 1978, Mining Geostatistics, Academic Press, New York, 600 p.
- [15] Pannatier, Y., 1993, Ms-Windows Program for exploratory variography and variogram modelling in 2D, International Workshop on Statistics of Spatial Processes-Theory and Applications, Bari, Italy 27-30 September 1993.
- [16] Krajewski, S. A. y Gibbs, B.L., 1993, A Variogram Primer, Gibbs Associates, 93 p.
- [17] Echaabi, J., Trochu, F. y Gauvim, R., 1995, A General Strength Theory for Composite Materials Based on Dual Kriging Interpolation, Journal of Reinforced Plastics and Composites, Vol.14, pp.211-232.
- [18] Wackernagel, H., 1995, Multivariate Geostatistic, an Introduction with applications, Berlin: Springer, 256 p.
- [19] Deutsch, C.V. y Journel, A.G., 1998, "GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide", Second Edition, Oxford University Press, 369 p.
- [20] Journel, A. G. y Huijbregts, C. J., 1978, Mining Geostatistics, Academic Press, New York, 600 p.
- [21] David, M., 1977, Geostatistical Ore Reserve Estimation, Elsevier, Amsterdam, 364 p.
- [22] Zimmerman, D.L., 1993, Another Look at Anisotropy in Geostatistics, Mathematical Geology, Vol. 25, No. 4, pp. 453-470.
- [23] Christensen, R., 1993, Quadratic Covariance Estimation and Equivalence of Predictions, Mathematical Geology, Vol. 25, No. 5, pp. 541-558.
- [24] Matheron, G., 1970, "La Théorie des Variables Regionalisées et ses Applications" Les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique de Fontainebleau, Fascicule 5, Ecole de Mines de Paris, 212 p.
- [25] Zhang, X.F., Van Eijkeren, J.C.H. y Heemink, A.W., 1995, On the Weighted Least Squares Method for Fitting a Semivariogram Model, Short Note, Computers & Geosciences, Vol. 21, No. 4, pp. 605,608.

## **Agradecimientos**

Se agradece el soporte financiero del *Instituto Tecnológico de Mexicali* para la presentación de este trabajo y al *Sistema Nacional de Educación Superior Tecnológica- Dirección General de Educación Tecnológica*, SES-ANUIES por hacer posible el desarrollo del mismo.

## **Correspondencia**

Dr. Joaquín Ordieres Meré.  
Universidad de la Rioja , c/ Luis de Ulloa 20  
26004 Logroño, LA RIOJA , España.  
e-mail: [joaquin.ordieres@dim.unirioja.es](mailto:joaquin.ordieres@dim.unirioja.es)