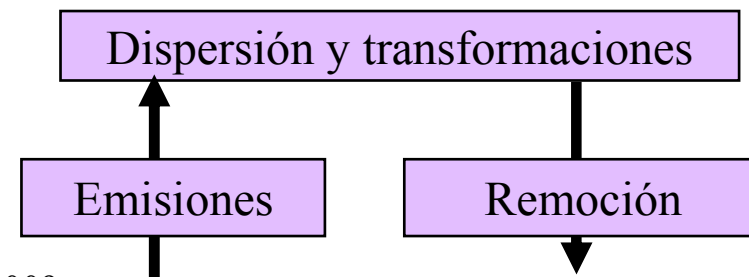


GF 3022

Contaminación Atmosférica

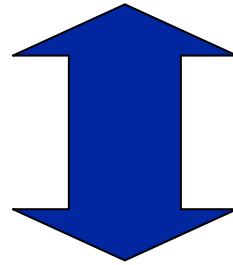
- *La ecuación a resolver*
- **Modelos gaussianos**
- **Modelos 0, 1, 2, 3, 4 D**
- **Evaluación de modelos**



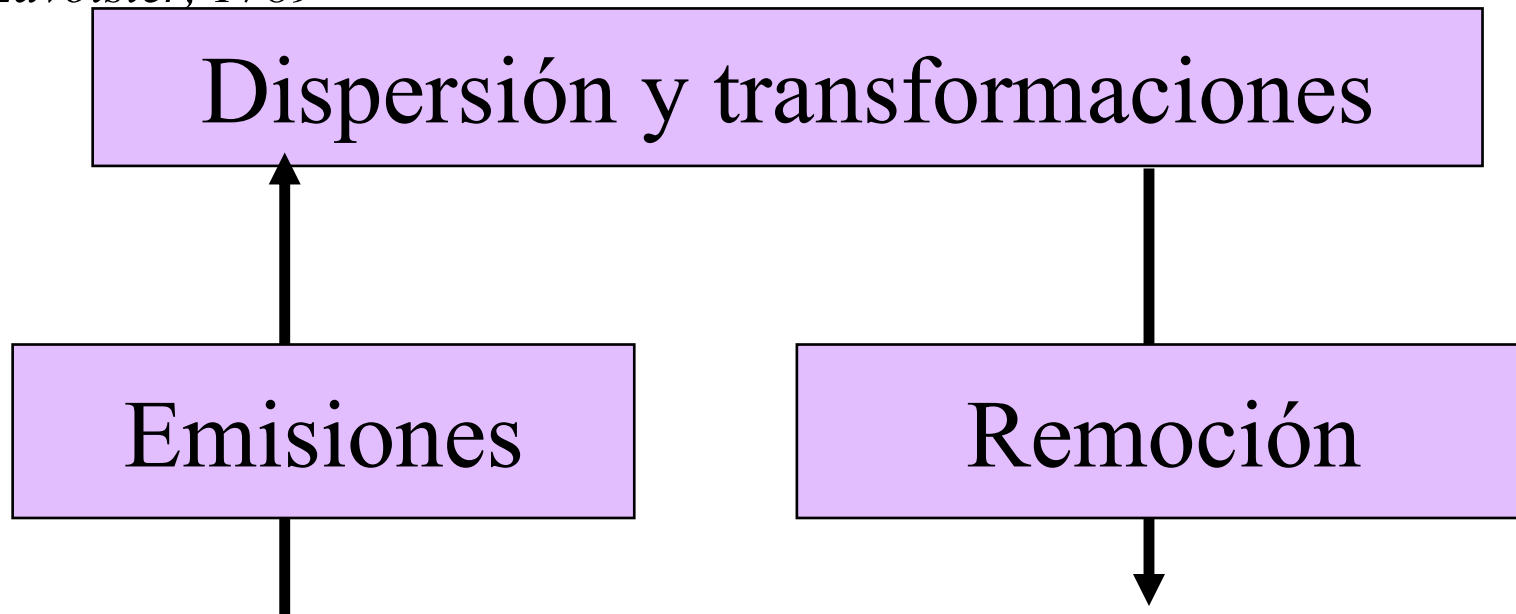
$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla c - c \nabla \cdot \vec{v} - \nabla \cdot (\langle c' \vec{v}' \rangle) + Q - S$$



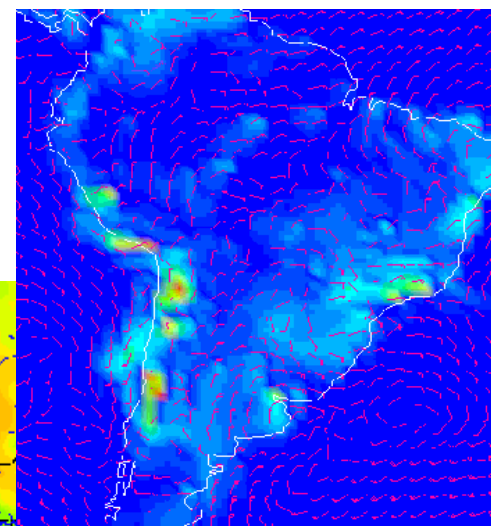
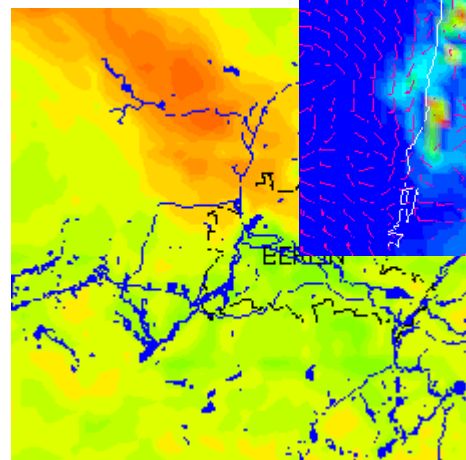
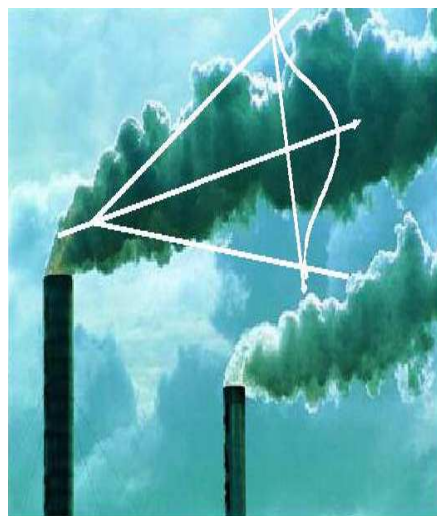
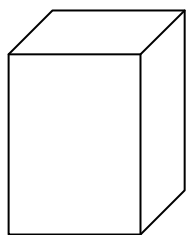
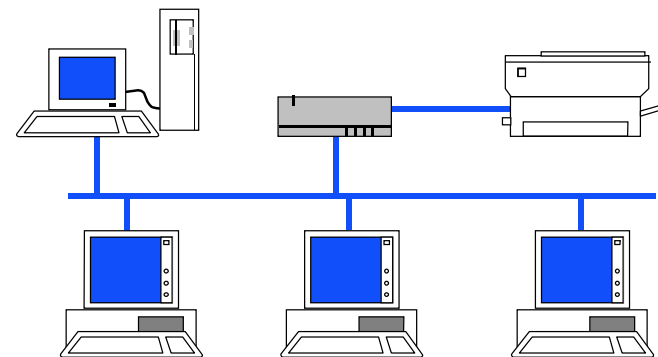
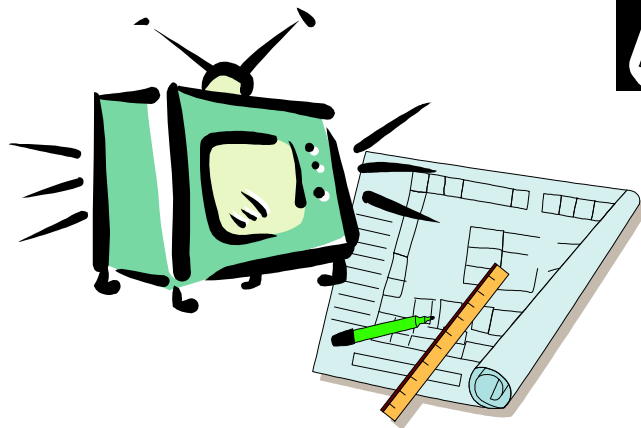
Lavoisier, 1789



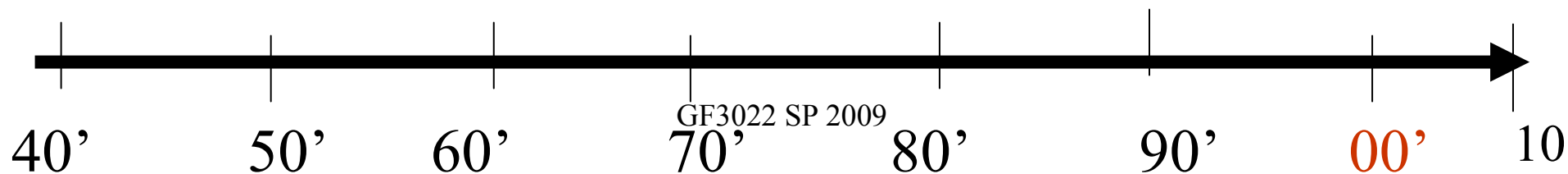
+CI & CB



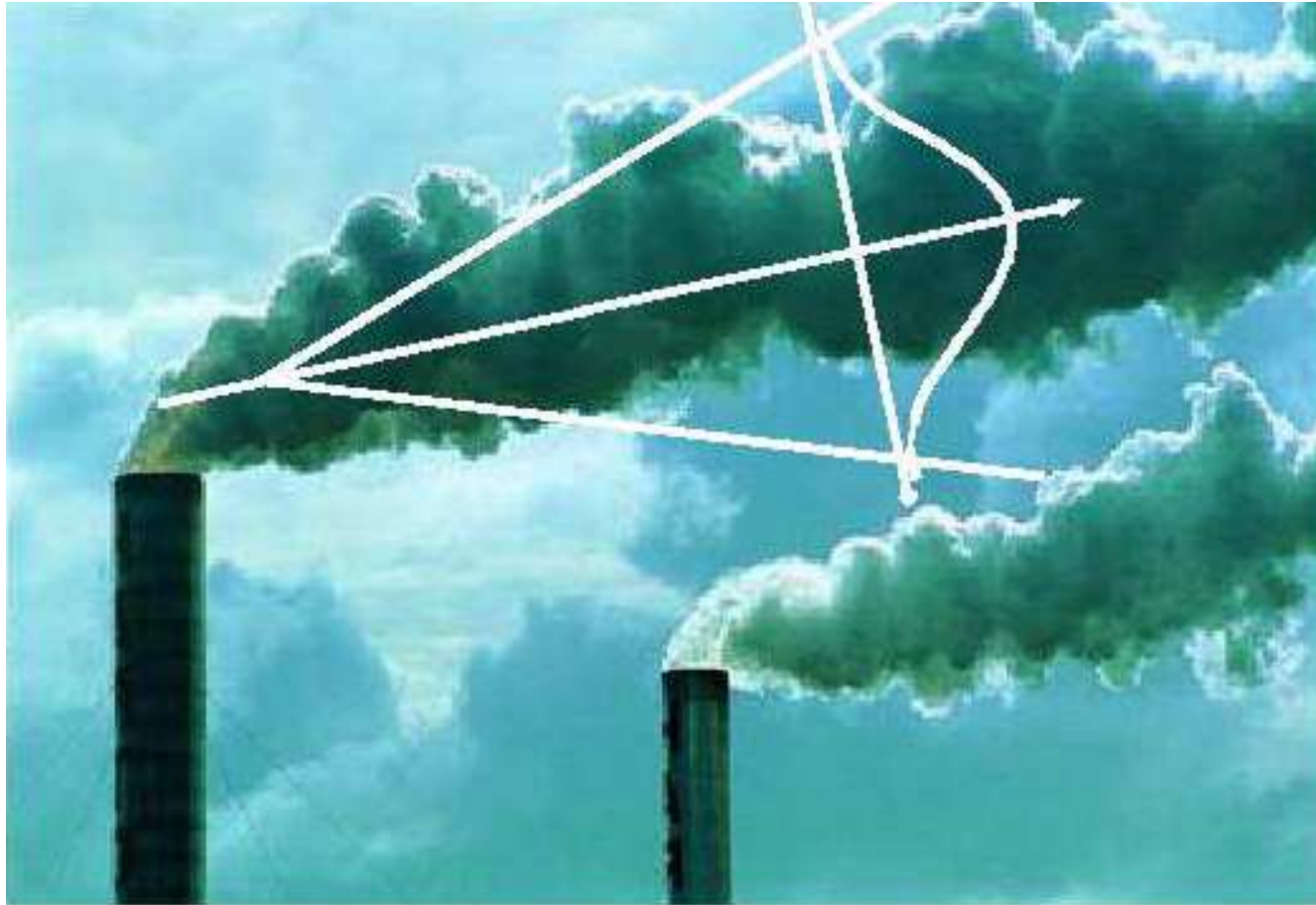
HISTORIA



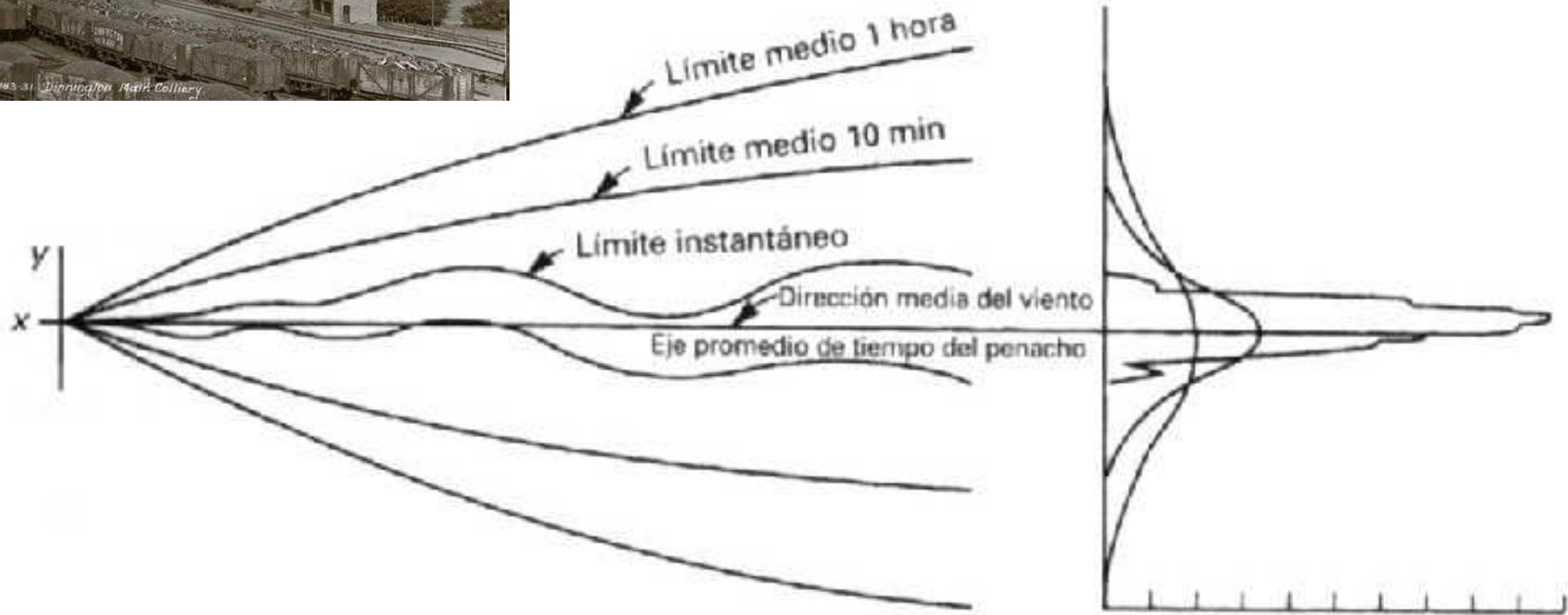
Ensemble



Modelos Gaussianos Estacionarios

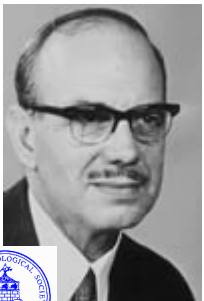


GF3022 SP 2009



(a) Vista en planta

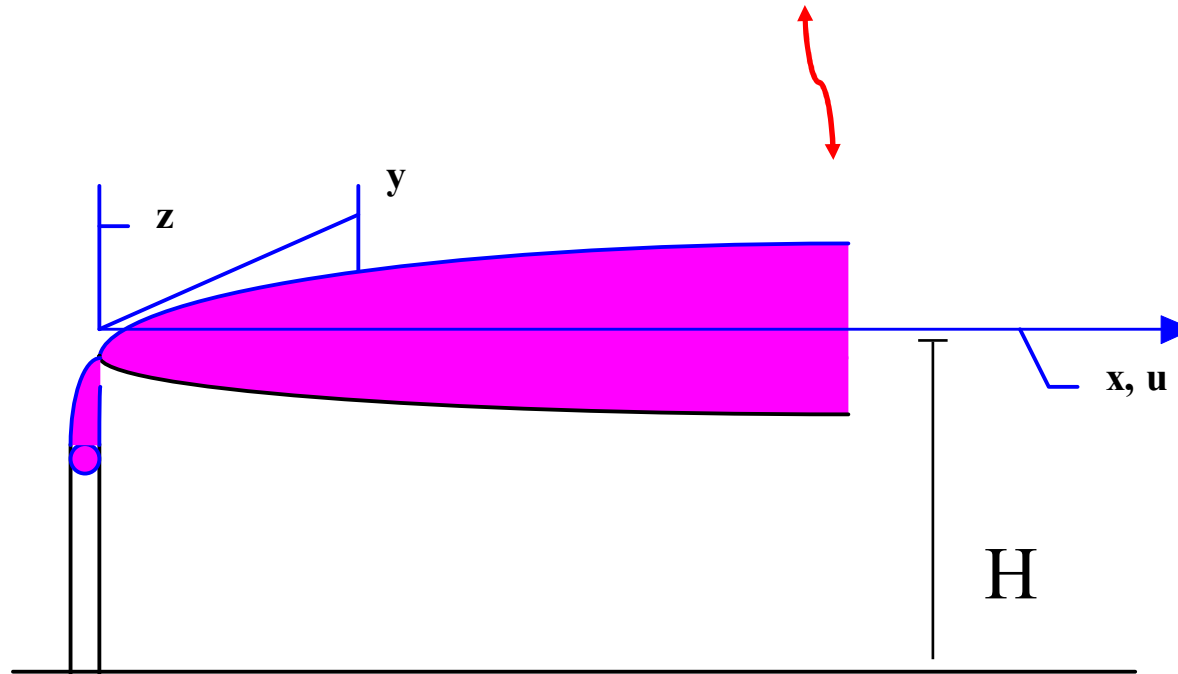
(b) Concentración relativa



Frank Pasquill
1914 – 1994

GF3022 SP 2009

$$\bar{c}(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{\sigma_z^2}\right)\right]$$



Desafío: ¡¡Estimar los sigmas!!

Los sigmas se determinan empíricamente....

$$\sigma_y(x) = \frac{k_1 x}{[1 + (x / k_2)]^{k_3}} \quad \sigma_z(x) = \frac{k_4 x}{[1 + (x / k_2)]^{k_5}}$$

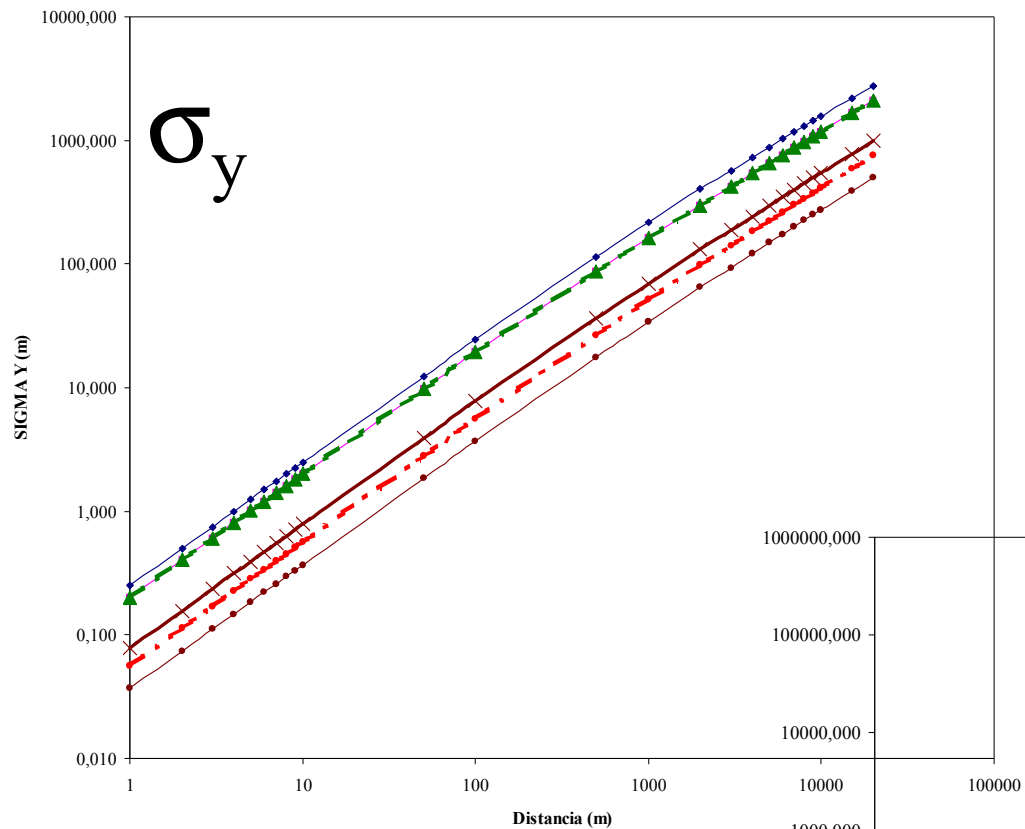
Clase de estabilidad	k ₁	k ₂	k ₃	k ₄	k ₅
A	0.250	927	0.189	0.1020	-1.918
B	0.202	370	0.162	0.0962	-0.101
C	0.134	283	0.134	0.0722	0.102
D	0.0787	707	0.135	0.0475	0.465
E	0.0566	1070	0.137	0.0335	0.624
F	0.0370	1170	0.134	0.0220	0.700

Pasquill, F. (1961). *The estimation of the dispersion of windborne material*, The Meteorological Magazine, vol 90, No. 1063, pp 33-49.

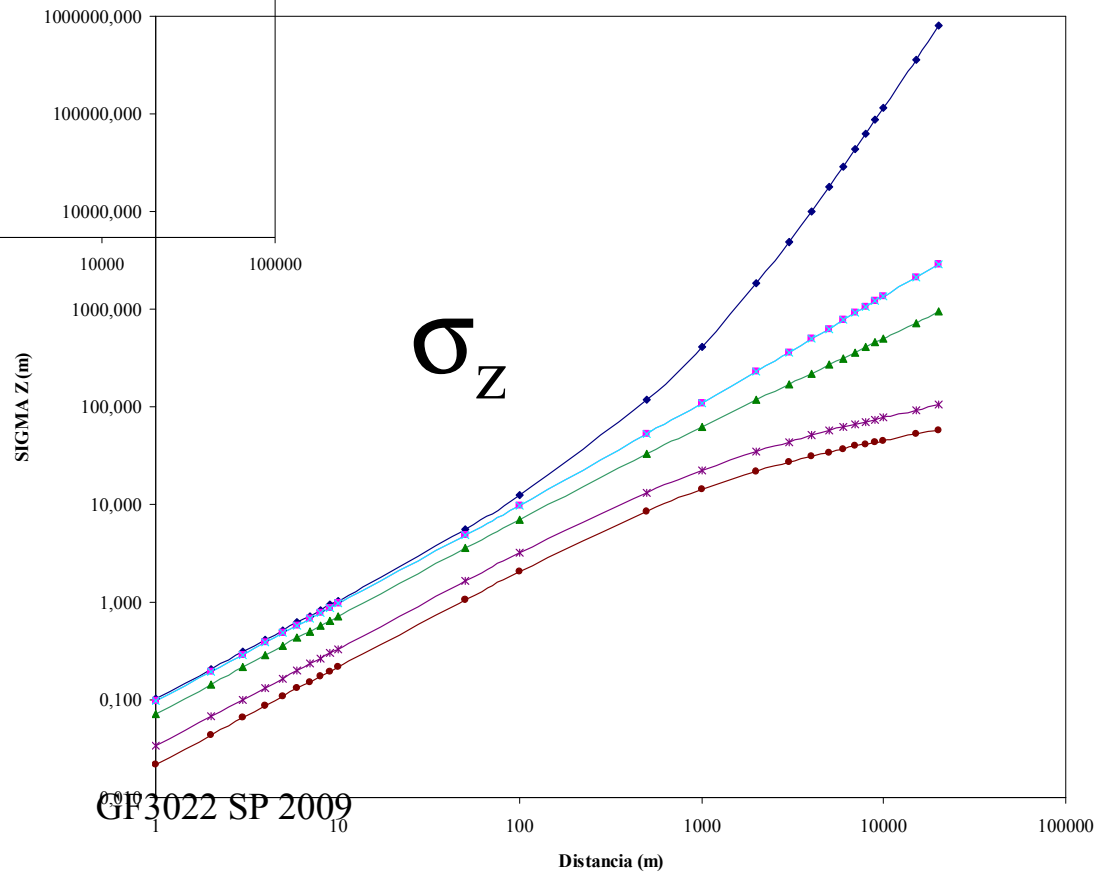
Clasificación de Pasquill

Viento (m/s)	Insolación fuerte	Insolación moderada	Insolación débil	Nubosidad nocturna inferior a 4/8	Nubosidad nocturna superior a 4/8
<2	A	A,B	B	-	-
2-3	A,B	B	C	E	F
3-5	B	B,C	C	D	E
5-6	C	C,D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

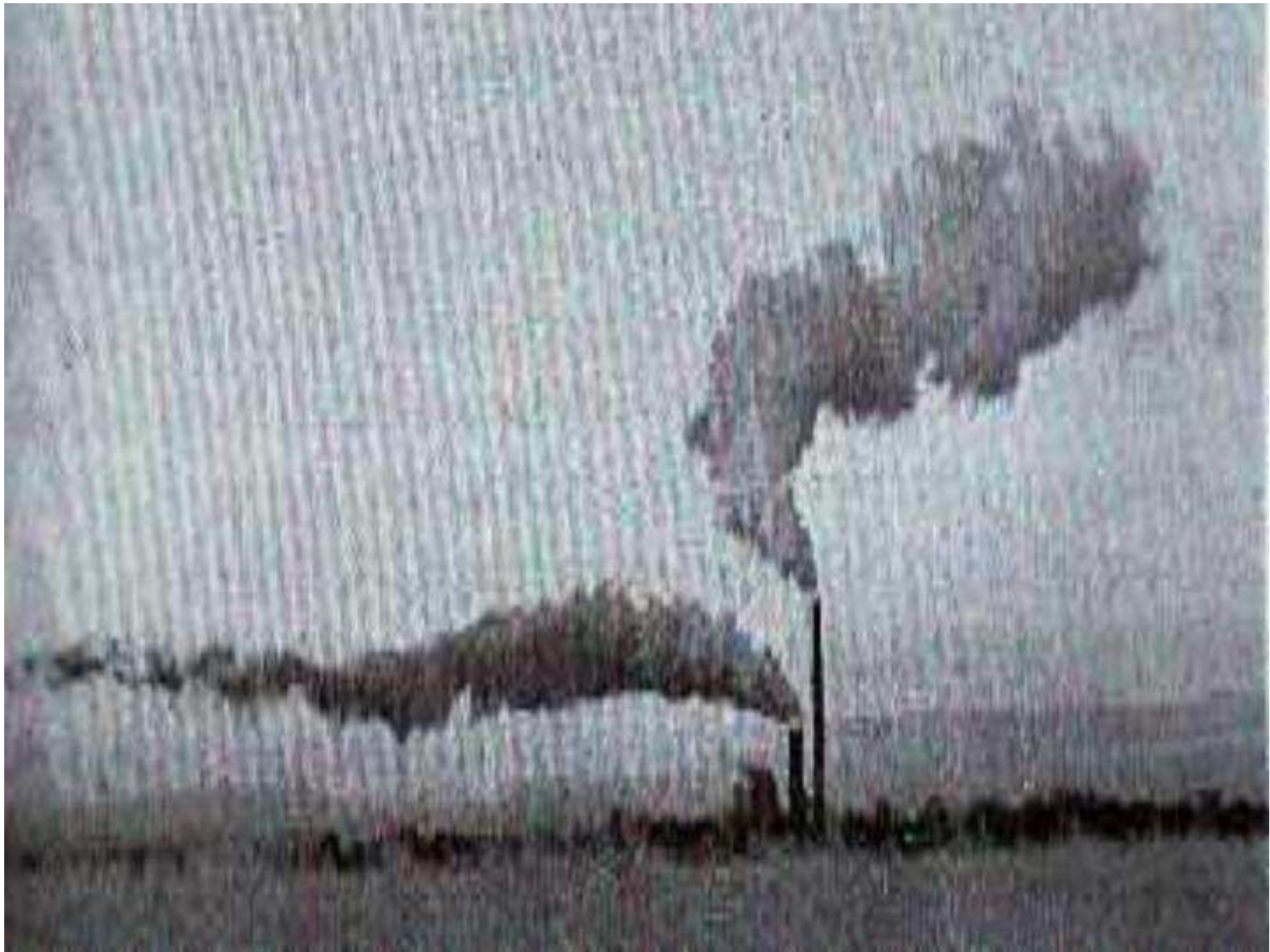
Pasquill, F. (1961). *The estimation of the dispersion of windborne material*, The Meteorological Magazine, vol 90, No. 1063, pp 33-49.



NB. La dispersión vertical es más sensible que la dispersión horizontal a las condiciones meteorológicas



GP3022 SP 2009



GF3022 SP 2009

Modelos Gaussianos Estacionarios

Ventajas

- Fáciles de usar (y adquirir)
- Solución sencilla a problemas complejos
- Se alimentan con inf. meteorológica simple

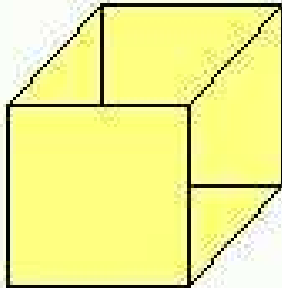
Desventajas

- Son empíricos
- No manejan bien:
 - calmas
 - transf. químicas
 - procesos de deposición
 - terrenos complejos

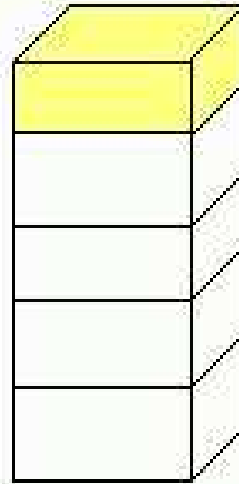
Típicamente, para modelos gaussianos...

- Condiciones ideales (gaussianas): cerca (10 km), tiempos cortos de promedio (min-hr), terreno plano, meteorología constante 10-20%
- Idem salvo fuentes en altura, 20-40%
- Condiciones no tan ideales pero no extremas....factor 2
- Condiciones extremas tipo bordes costeros...orden de magnitud

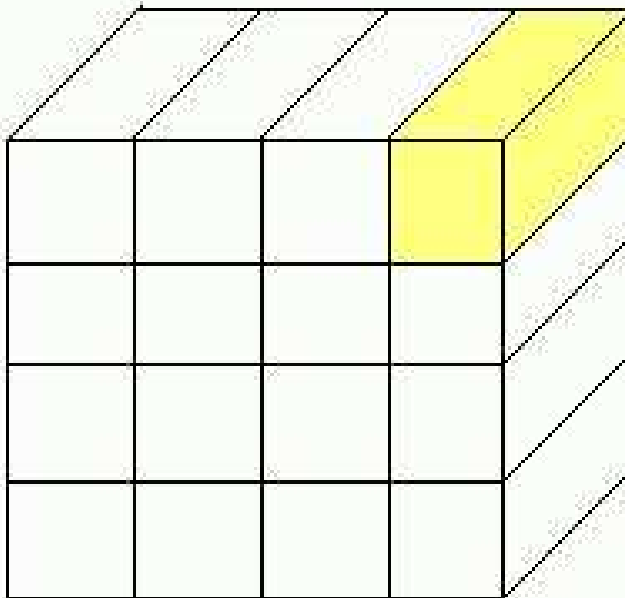
Box (0-D)



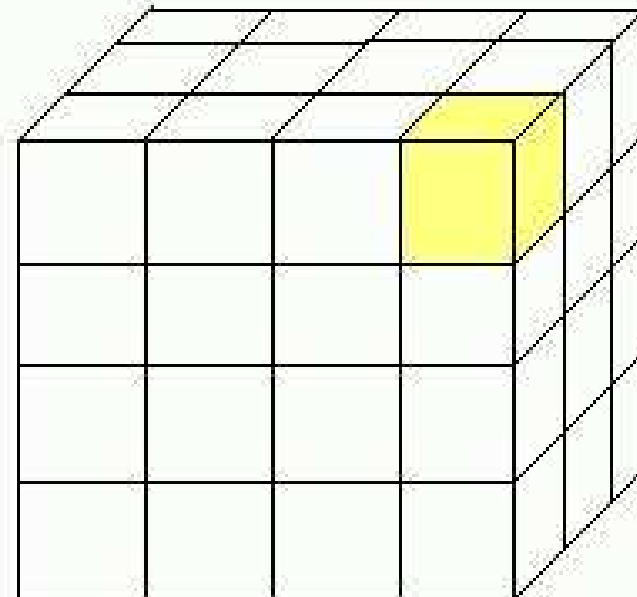
Column (1-D)



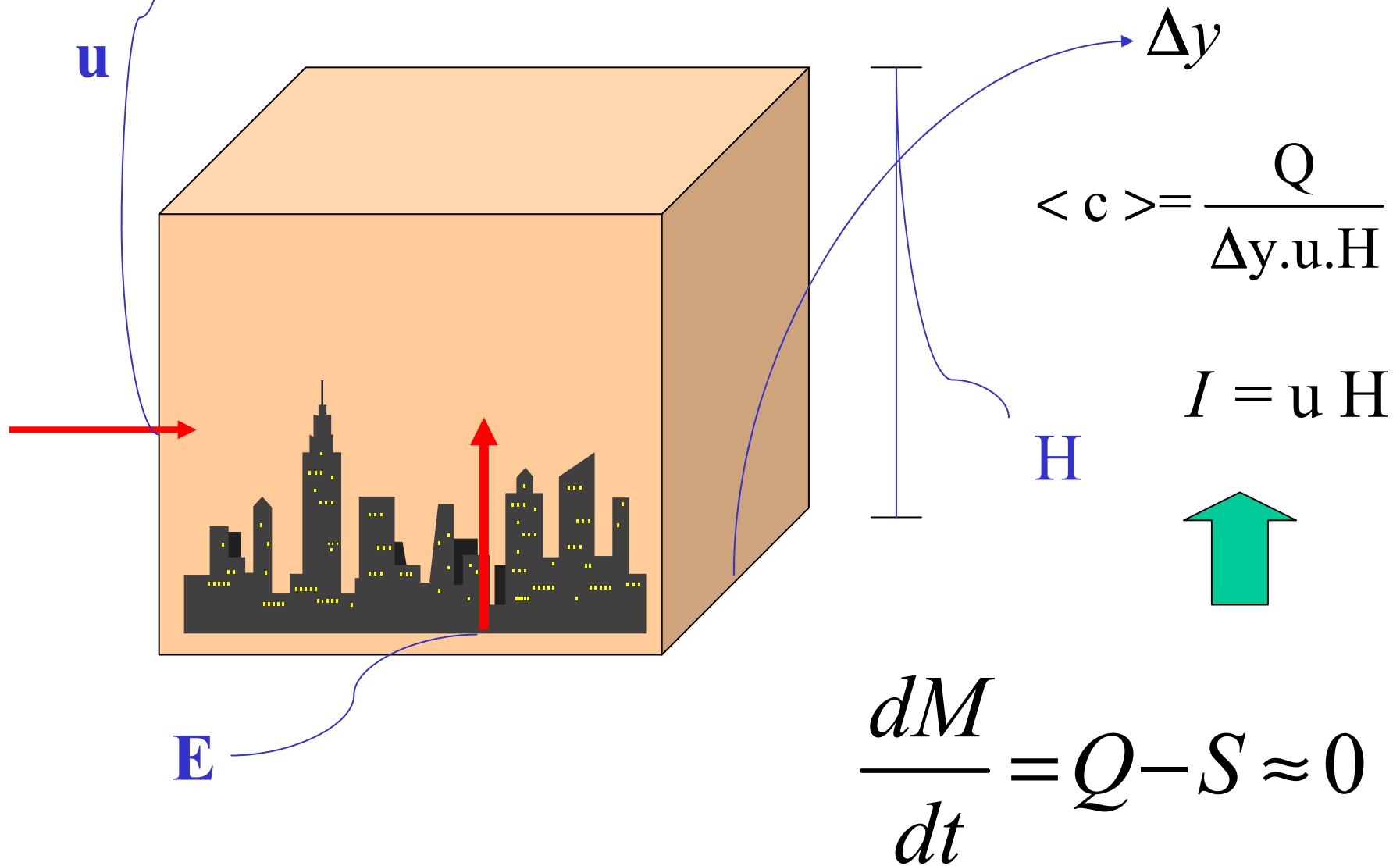
2-D



3-D

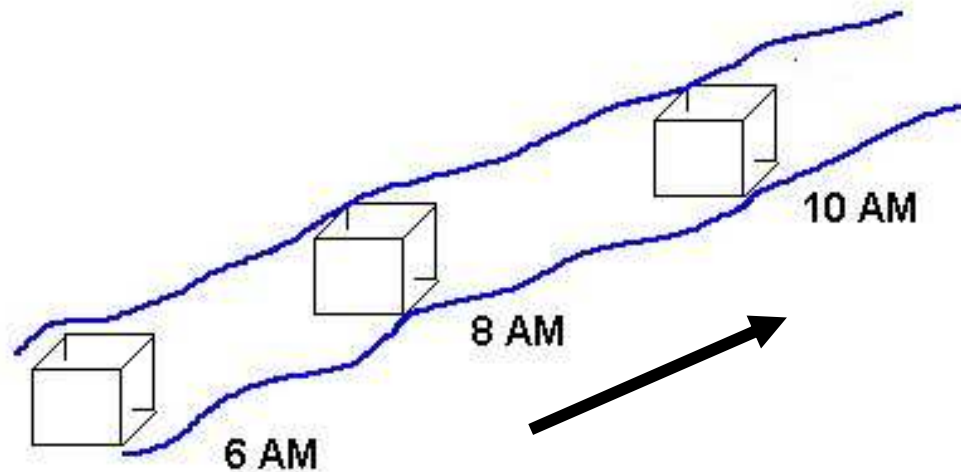


Modelos de Caja/Aprox. estacionaria



Aproximación à la Lagrange...

$$\frac{dC}{dt} = -c\nabla \cdot \vec{v} - \nabla \cdot (\langle c'\vec{v}' \rangle) + Q - S$$



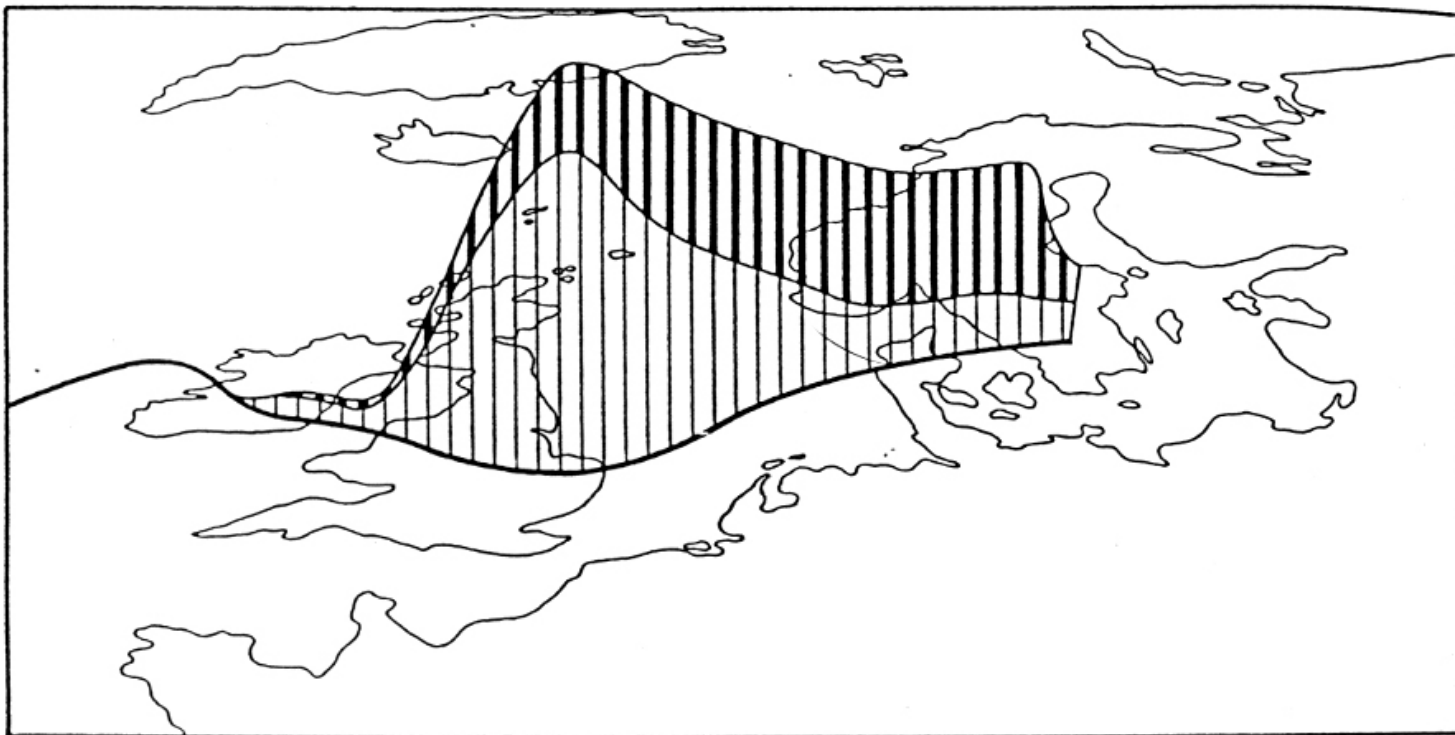
$$\frac{d(CH)}{dt} = \frac{E}{\Delta x \Delta y} + RH - \frac{S}{\Delta x \Delta y}$$

$$\frac{dC_1}{dt} = (1 - \alpha - \beta) \frac{Q}{D} - \left(\frac{v_1}{D} + k_t + k_{w1} \right) C_1$$

$$\frac{dC_2}{dt} = \beta \frac{Q}{D} + k_t C_1 - \left(\frac{v_2}{D} + k_{w2} \right) C_2$$

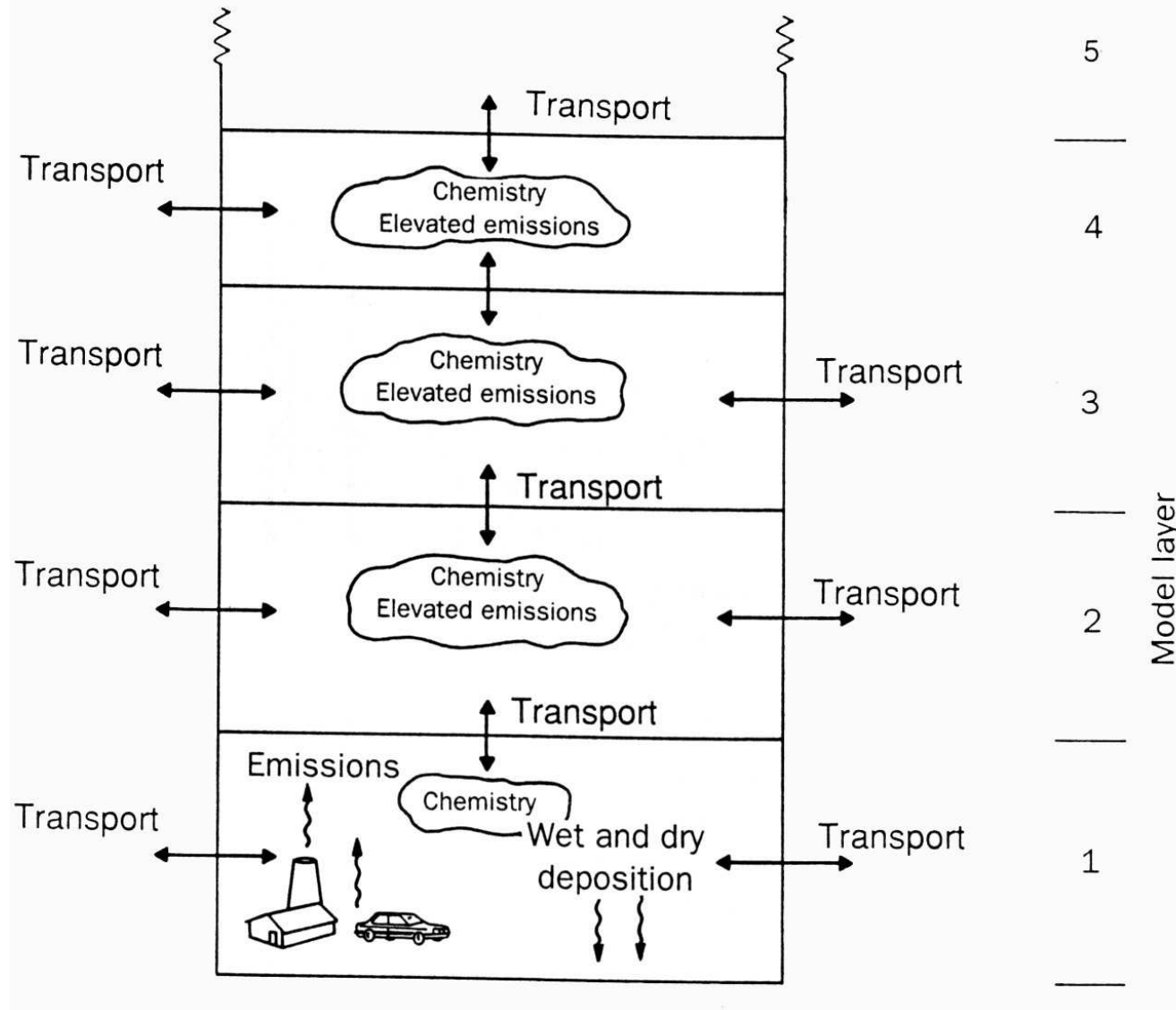
EMEP

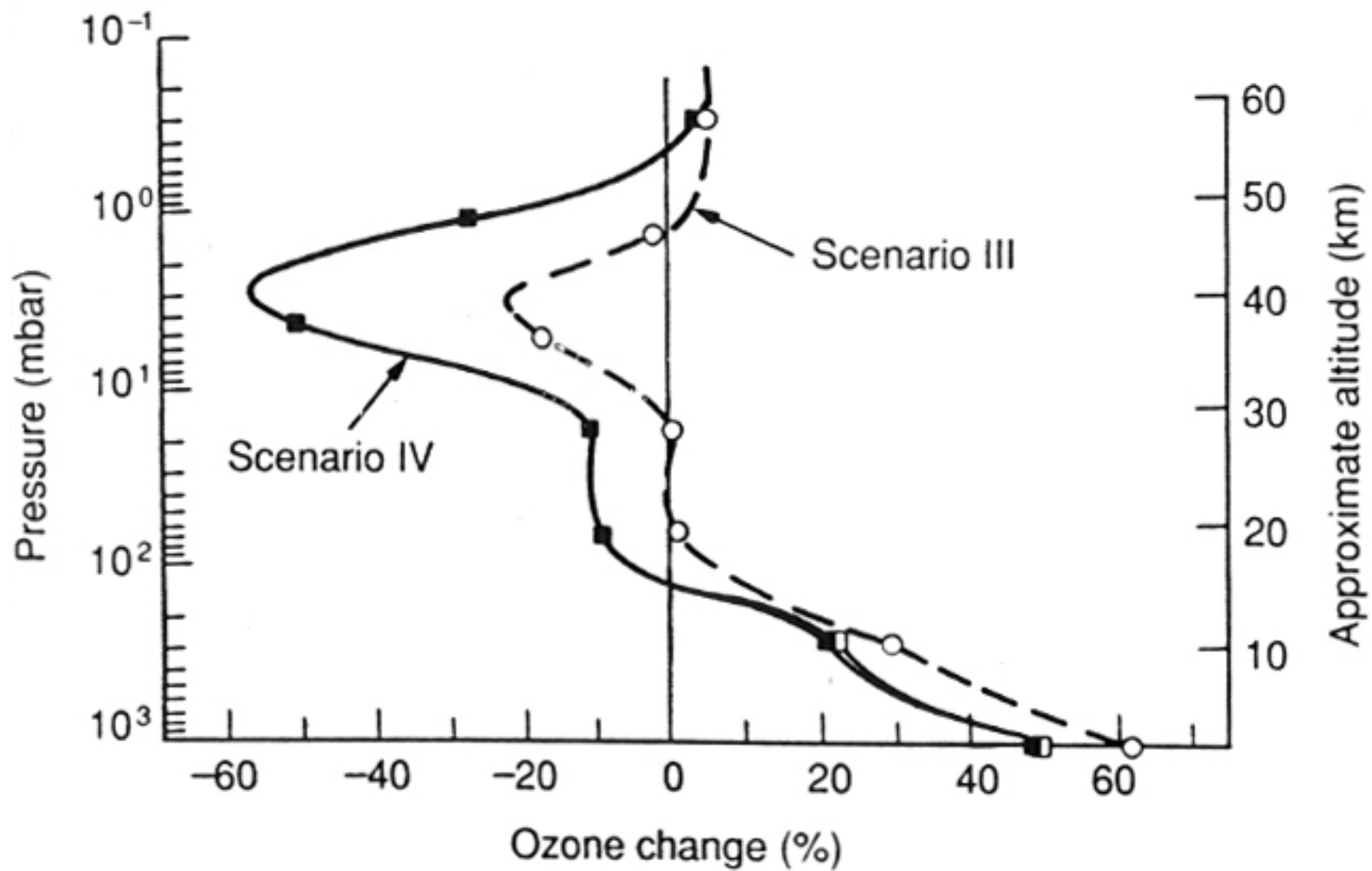
Eliassen et al, 1982. *J. appl. Met.*,
21, 1645-1661

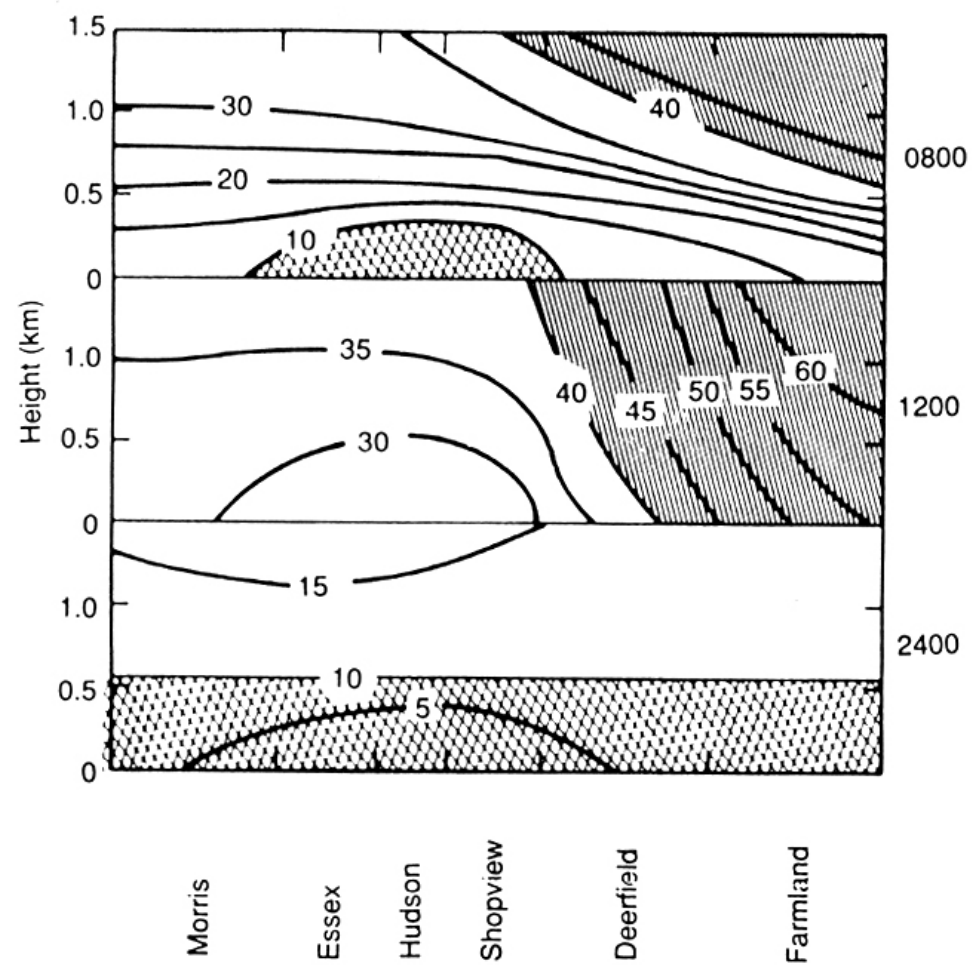
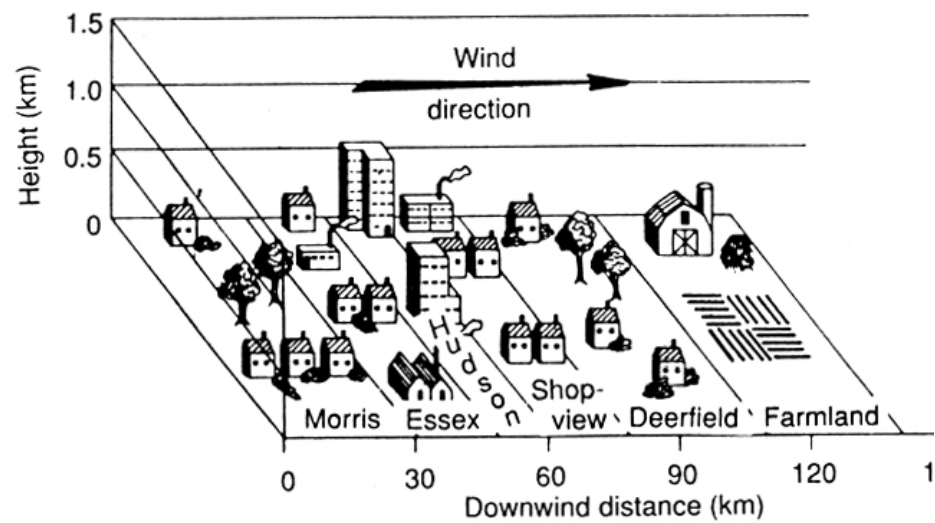


 SO₂ - S
  SO₄ - S
 $\left. \begin{matrix} 2 \\ 0 \end{matrix} \right\} \mu\text{g}/\text{m}^3$

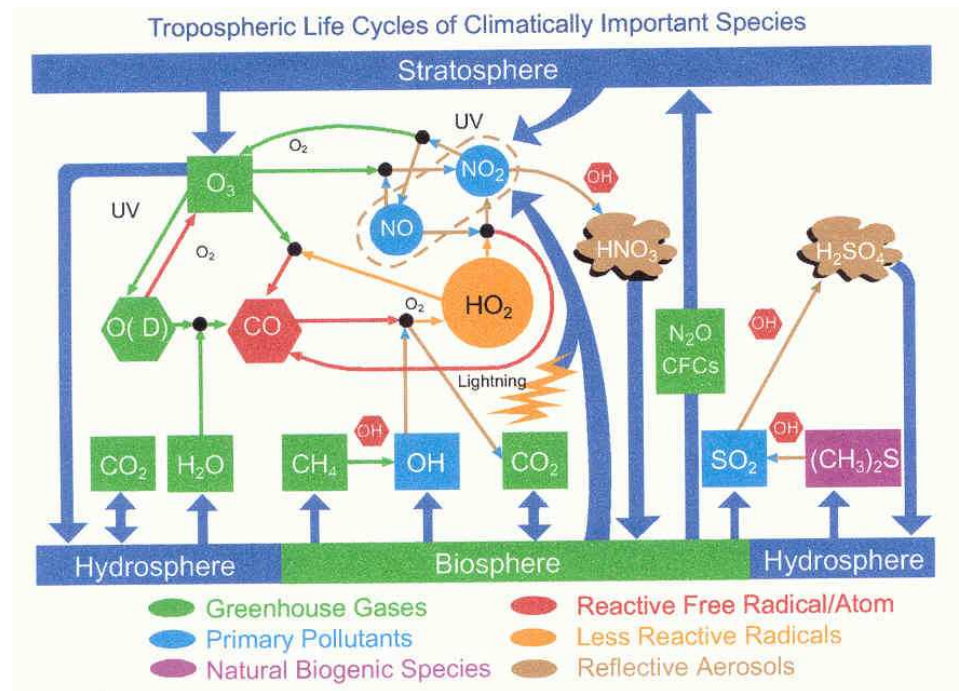
Modelos Unidimensionales (1-D)







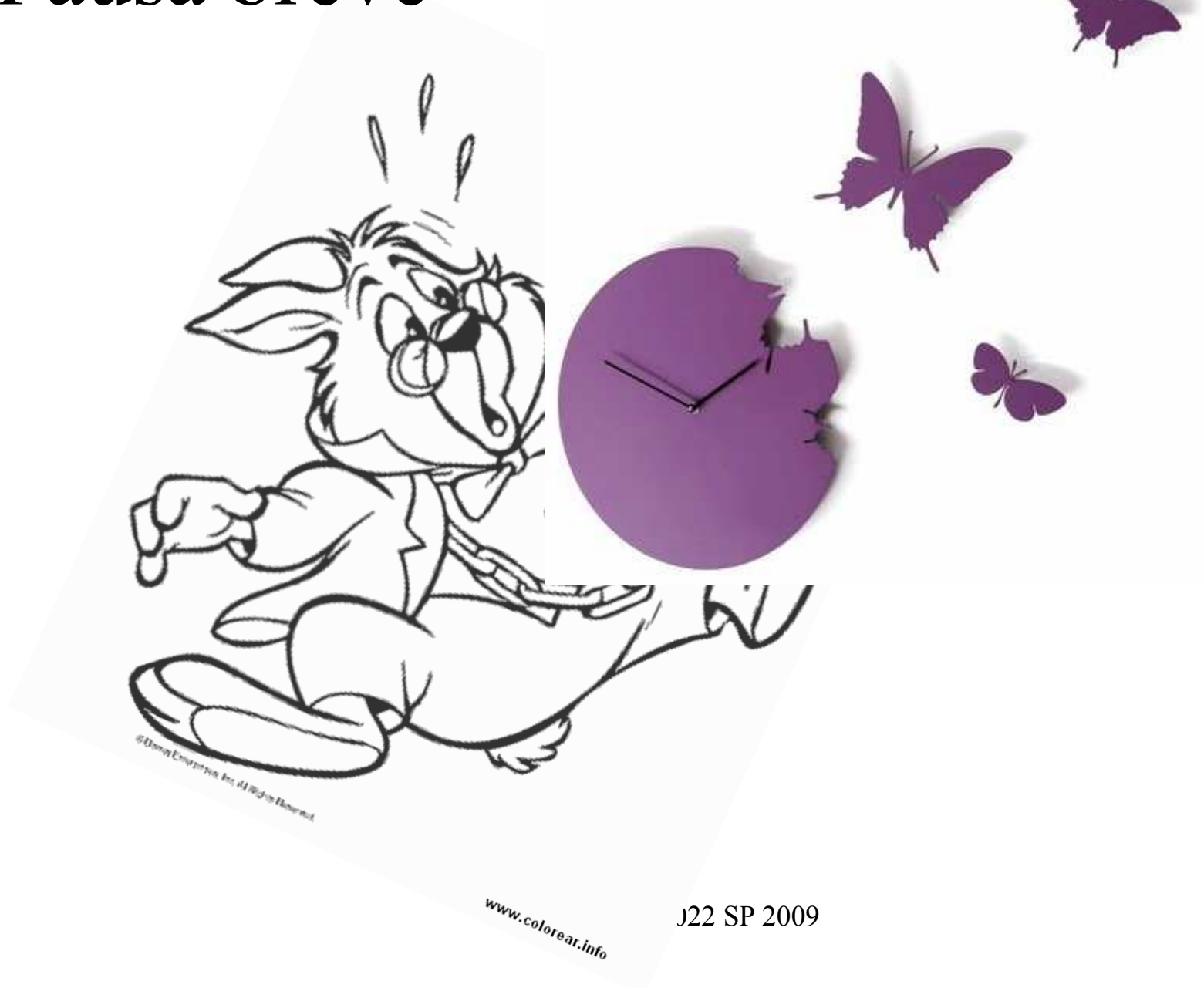
GF302



3-D



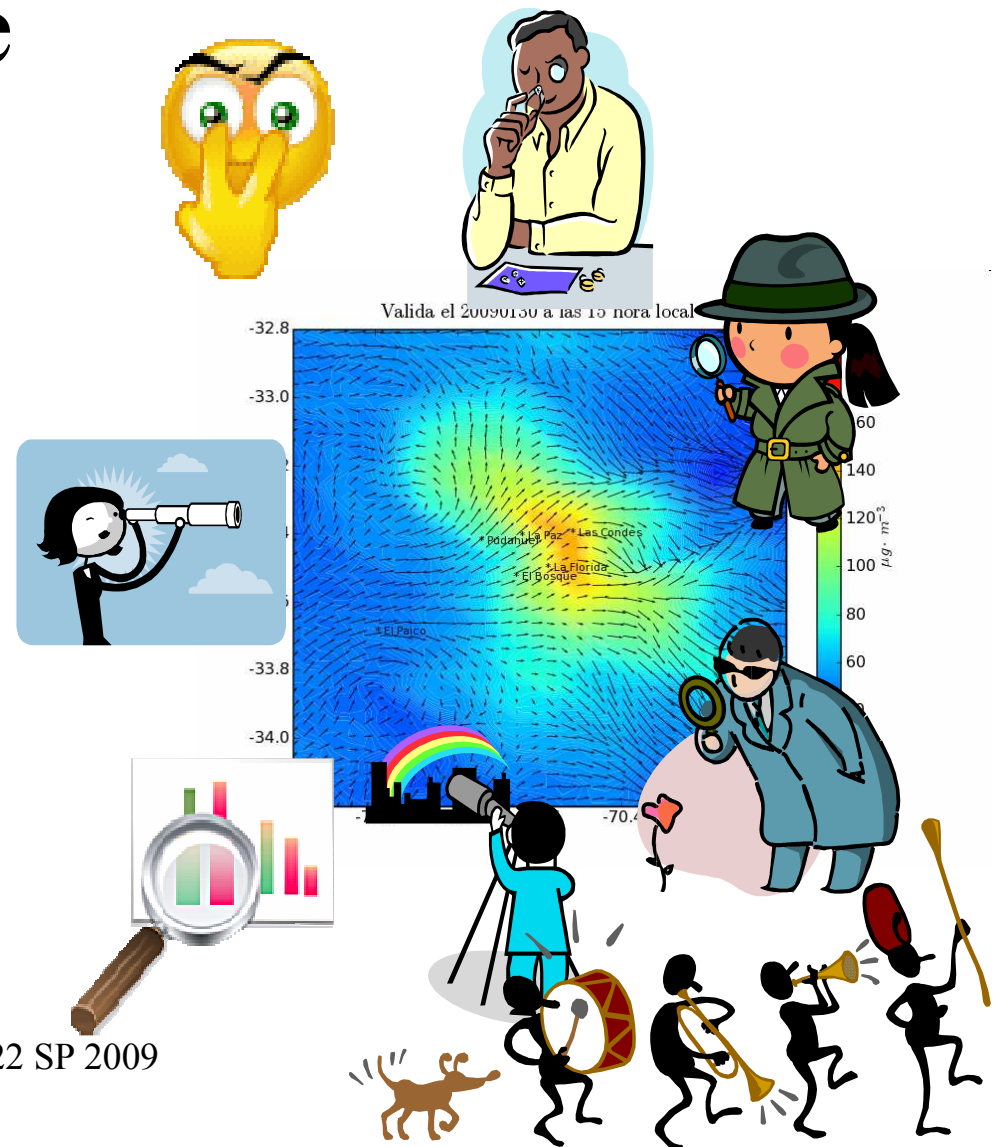
Pausa breve

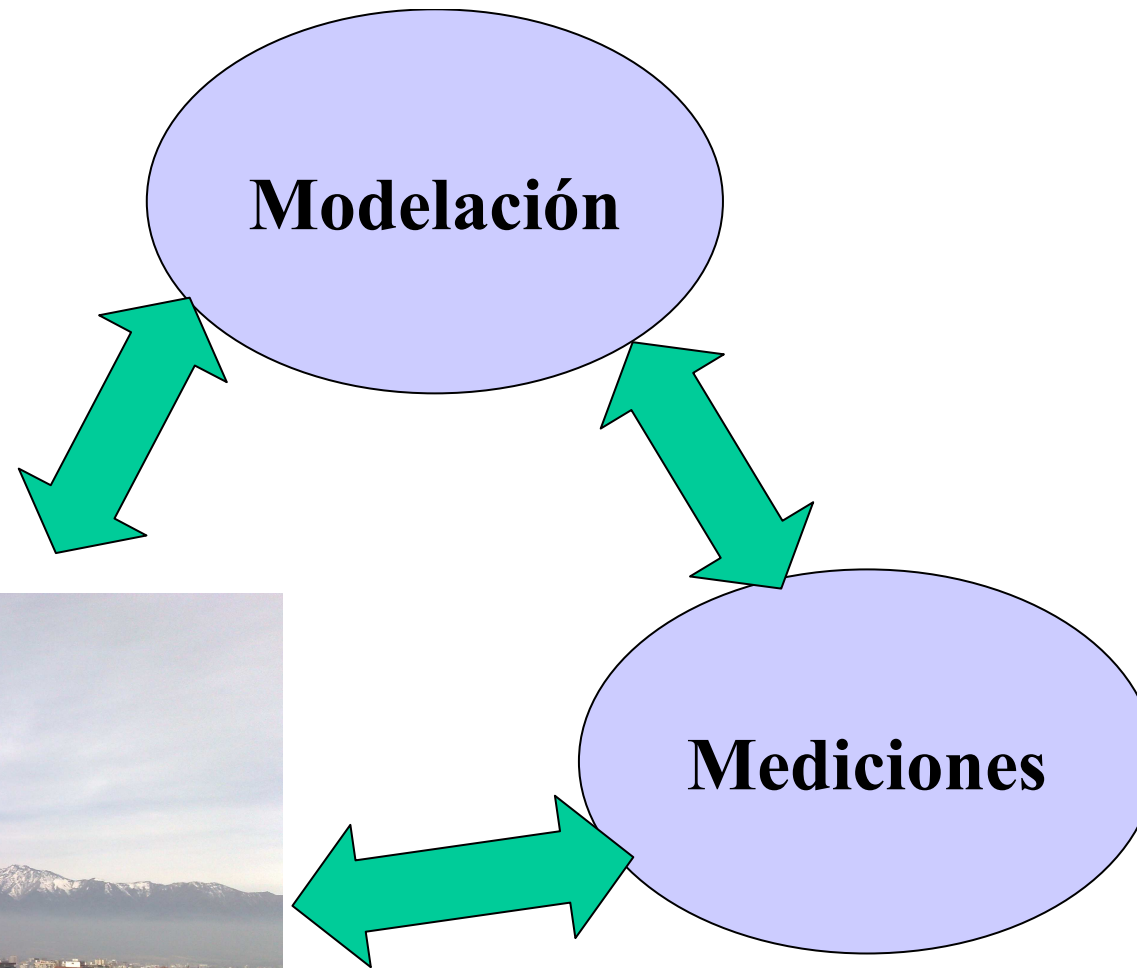


J22 SP 2009

Contenidos: **evaluación** de modelos de calidad del aire

- Física en modelos vs. física observada
 - Precisión vs exactitud
- Indicadores estadísticos
- Intercomparación y *ensemble*
- Modelación inversa (sensibilidad)



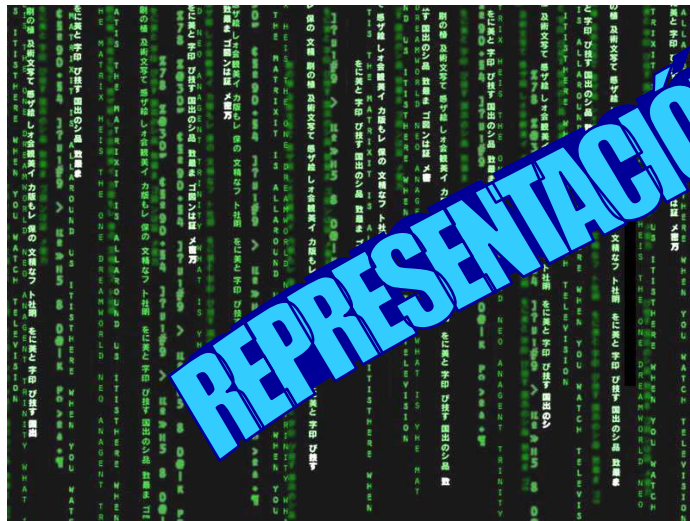


Modelos y observaciones/mediciones son instrumentos de entendimiento: tienen **errores** asociados y son **complementarios**

Modelos de dispersión

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla c - c \nabla \cdot \vec{v} - \nabla \cdot (\langle c' \vec{v}' \rangle) - S$$

+CI & CB



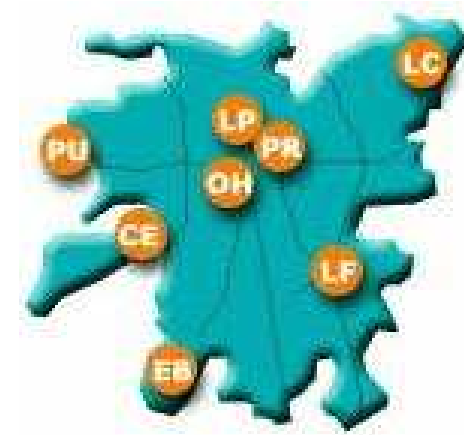
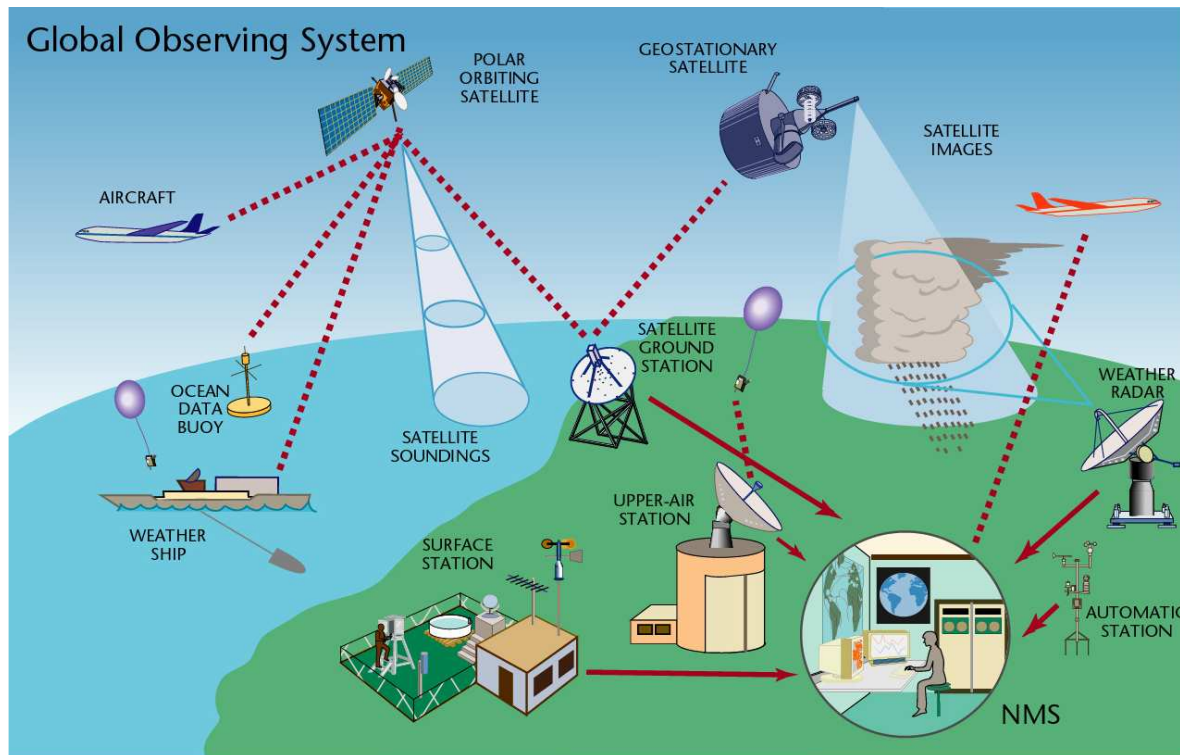
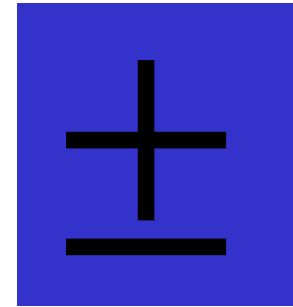
Abstracción...Simplificación...Síntesis...Diagnóstico...Pronóstico

Tras un modelo SIEMPRE hay APROXIMACIONES y datos inciertos

- Datos de entrada con errores inciertos (e.g., inventarios de emisiones; tasas de reacción y fotólisis)
- Escalas no representables explícitamente (parametrizaciones)
- Errores numéricos y computacionales
- Comprensión incompleta o errónea de procesos



Las observaciones son siempre imperfectas e insuficientes



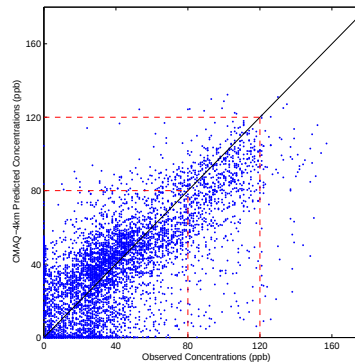
NB. Los modelos atmosféricos tienen hoy $\sim 10^6$ - 10^8 variables de entrada y $\sim 10^8$ - 10^{10} variables de salida.



Errores

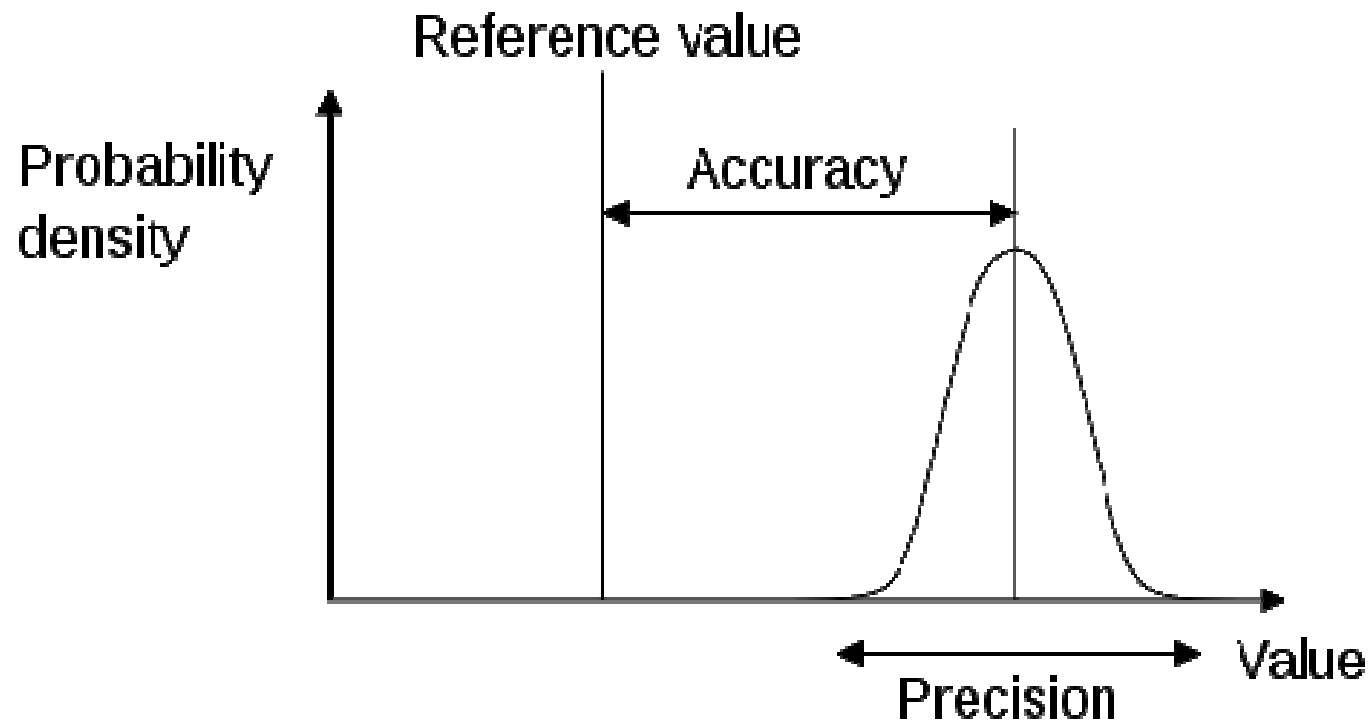


- Error: del Latín errare...vagar
- Definición: Diferencia entre el valor medido o calculado y el real



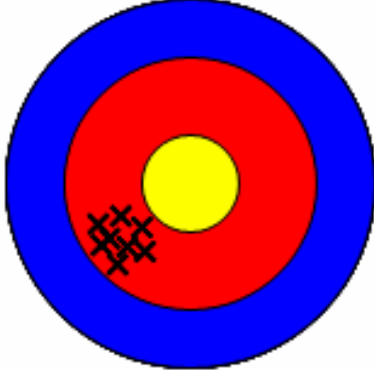
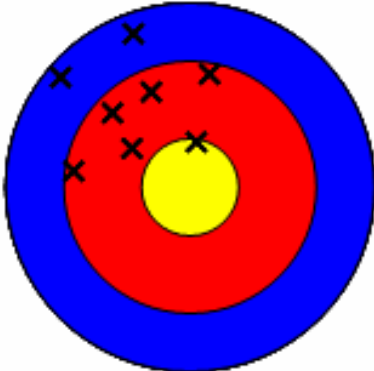
- Pueden ser: aleatorios o sistemáticos

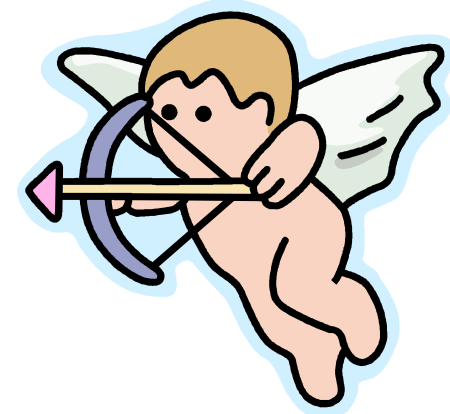
Exactitud vs precisión



¡¡Las ciencias naturales aspiran a la exactitud pero sólo pueden asegurar precisión!!

...exactitud vs precisión

	Accurate	Inaccurate (systematic error)
Precise		
Imprecise (reproducibility error)		



Indicadores de error

“Sesgo medio (Mean Bias)”

$$MB = \frac{1}{mn} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m PRED_{i,j} - OBS_{i,j}$$

“Error medio (Mean Error)”

$$ME = \frac{1}{mn} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m |PRED_{i,j} - OBS_{i,j}|$$

“Sesgo medio normalizado
(Mean Normalized
Bias)”

$$MNB = \frac{1}{mn} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{PRED_{i,j} - OBS_{i,j}}{OBS_{i,j}}$$

“Error bruto, medio, absoluto, normalizado
(Mean Absolute Normalized
Gross Error)”

$$MANGE = \frac{1}{mn} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left| \frac{PRED_{i,j} - OBS_{i,j}}{OBS_{i,j}} \right|$$

Diagrama de Taylor

$$\bar{E} = \bar{f} - \bar{r}$$

Sesgo (“bias”)

$$E' = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N [(f_n - \bar{f}) - (r_n - \bar{r})]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

Error cuadrático medio centrado (“RMSE”)

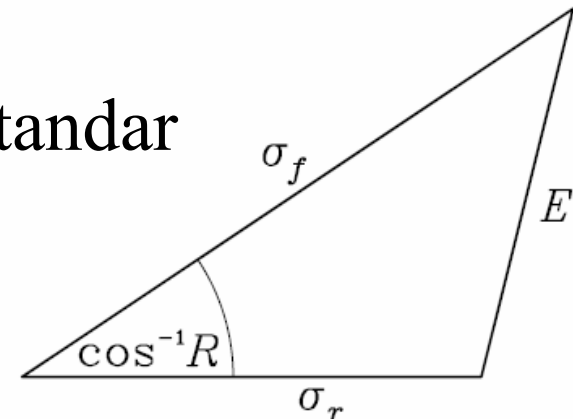
$$R = \frac{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (f_n - \bar{f})(r_n - \bar{r})}{\sigma_f \sigma_r},$$

Correlación

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

Desviación estandar

f: modelo; r: observación



Ref. Taylor, 2001

GF3022 SP 1

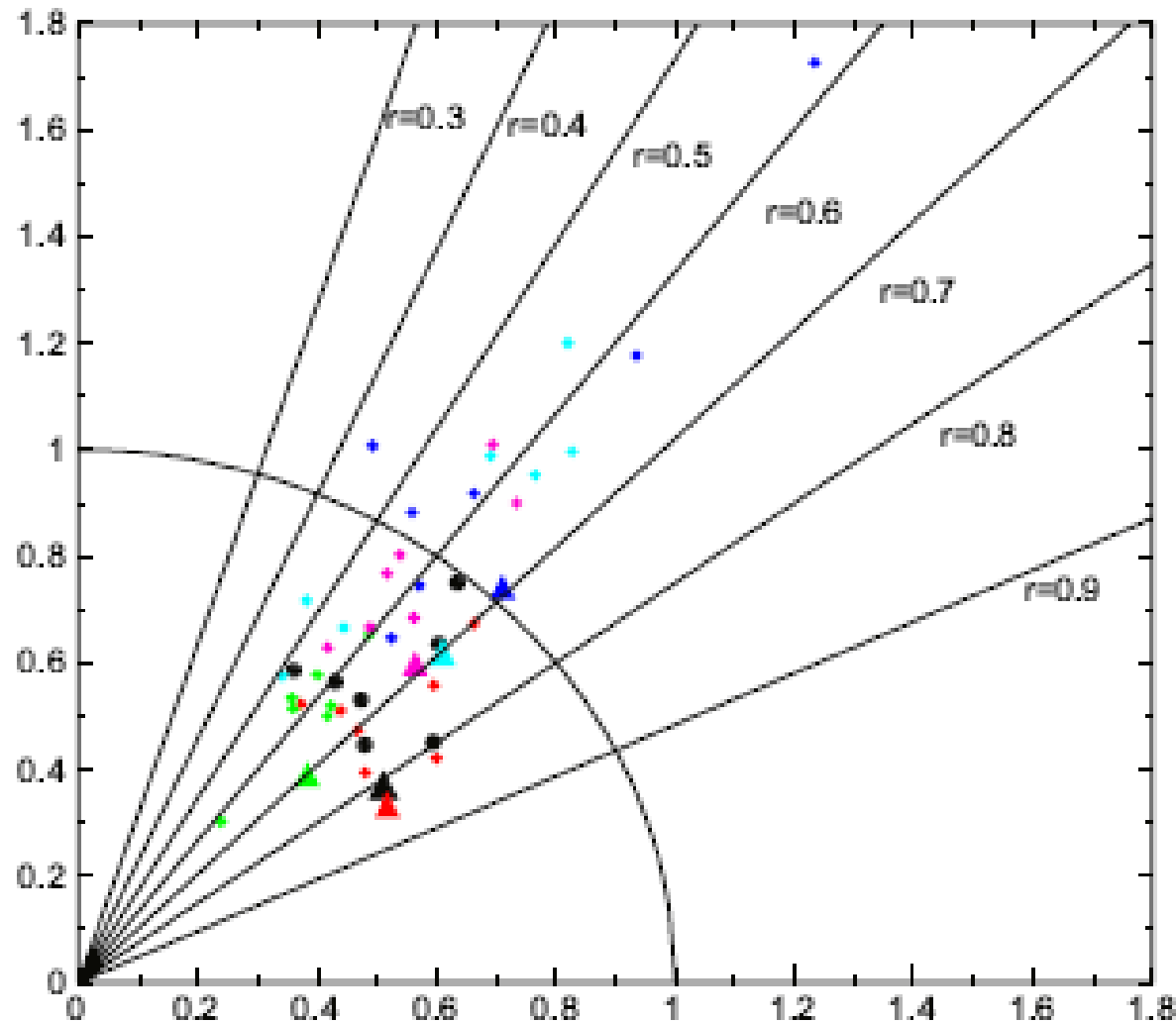


Diagrama de Taylor
normalizado para la
intercomparación de 7
modelos y su
“ensemble”

Vautard et al, 2008 (AE)

¿Cuál(es) indicador(es) estadístico(s) conviene(n)?

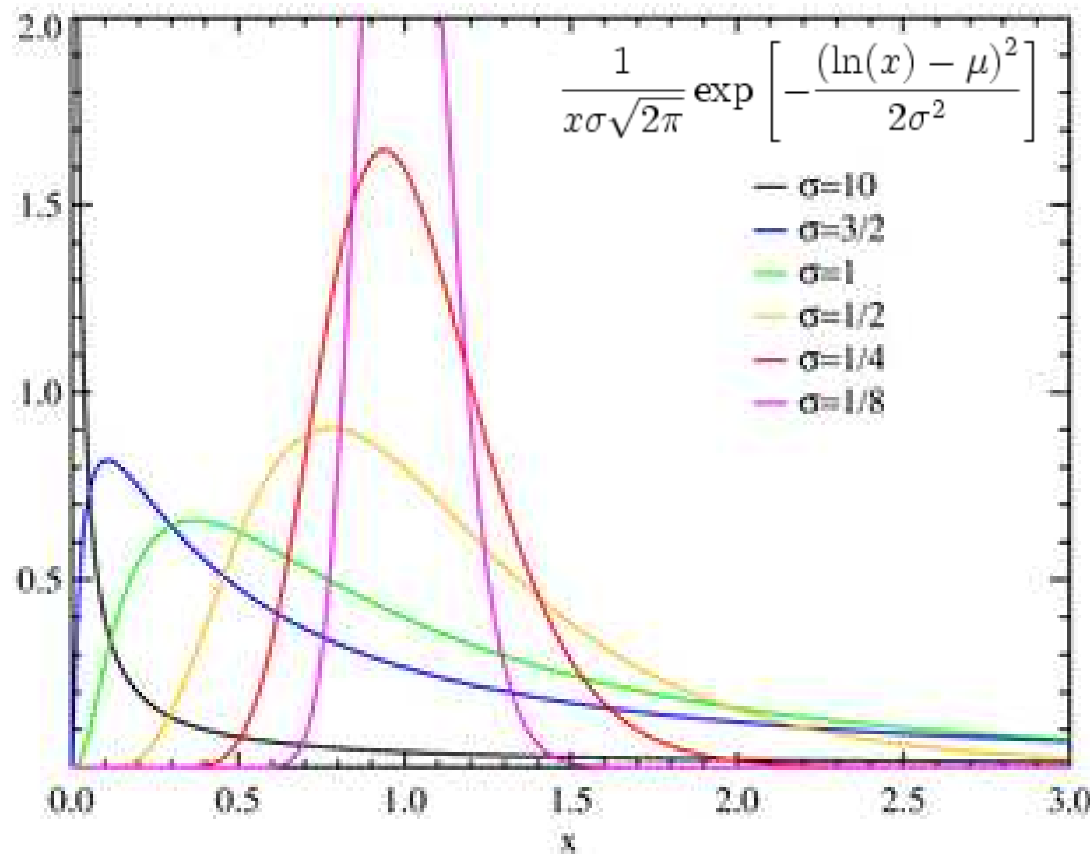
Table 1

Statistical quality indicators for air quality model performance evaluation

Quality indicators	Formula	Range of acceptable values	Ideal value	Observations
Correlation coefficient	$r = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (C_{oi} - \bar{C}_o)(C_{pi} - \bar{C}_p)}{\sqrt{n} \sigma_o \sigma_p} \right]$	0–1	1.0	C_o and C_p are the concentration observed and predicted
Fractional bias	$FB = \frac{\bar{C}_o - \bar{C}_p}{0.5(\bar{C}_o + \bar{C}_p)}$	(–2)–2	0.0	$\bar{C}_o$ and $\bar{C}_p$ are the averaged concentration observed and predicted
Root mean squared error	$RMS = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_{oi} - C_{pi})^2}$	n.a.	0.0	σ_o and σ_p are the standard deviations of observations and predictions
Normalized standard deviation	$NSD = \frac{\sigma_p}{\sigma_o}$	0–1	1.0	
Normalized mean square error	$NMSE = \frac{(\bar{C}_o - \bar{C}_p)^2}{\bar{C}_o \bar{C}_p}$	n.a.	0.0	
Average normalized absolute bias	$ANB = \left(\frac{\bar{C}_o - \bar{C}_p}{\bar{C}_o} \right)$	n.a.	0.0	
Geometric mean bias	$MG = \exp(\ln \bar{C}_o - \ln \bar{C}_p)$	>0.0	1.0	C_{oi} and C_{pi} are the observed and predicted concentration in monitoring station “i”, n the total number of monitoring stations.
Geometric variance	$VG = \exp \left[(\ln \bar{C}_o - \ln \bar{C}_p)^2 \right]$	>0.0	1.0	
Fraction of predictions within a factor of 2 of observations	$\frac{C_p}{C_o}$	0.5–2	1.0	
Index of agreement	$d = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n C_{pi} - C_{oi} ^2}{\sum_{i=1}^n (C_{pi} - \bar{C}_o + C_{oi} - \bar{C}_o)^2}$	0–1	1.0	<i>Borrego et al, 2008 (A E)</i>

n.a. — not applicable.

Notar que las concentraciones de trazas atmosféricas suelen ser log-normales (no gaussianas)



RMS o sesgo pueden ser engañosos por los valores extremos

Sesgo y varianza geométrico son mejores pero no tratan bien el extremo inferior

No hay evaluaciones estadísticas “normalizadas”
 ...pero hay a veces recomendaciones **según el interés**

EPA's quality indicators for air quality model performance evaluation		
Quality indicators	EPA	Ideal values
Normalized accuracy of the maximum 1 h concentration unpaired in space and time	$A_d = 100 \left(\frac{C_{O_{max}} - C_{P_{max}}}{C_{P_{max}}} \right)$	$\pm 15-20\%$
Normalized bias test	$D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{C_{O_i} - C_{P_i}}{C_{O_i}}$	$\pm 5-15\%$
Gross error of all pairs $C_o > 60$ ppb	$E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{C_{O_i} - C_{P_i}}{C_{O_i}}$	$\pm 30-35\%$

E.g., para fines regulatorios, ¿cuán bien se describen los máximos horarios de ozono? (Salud)

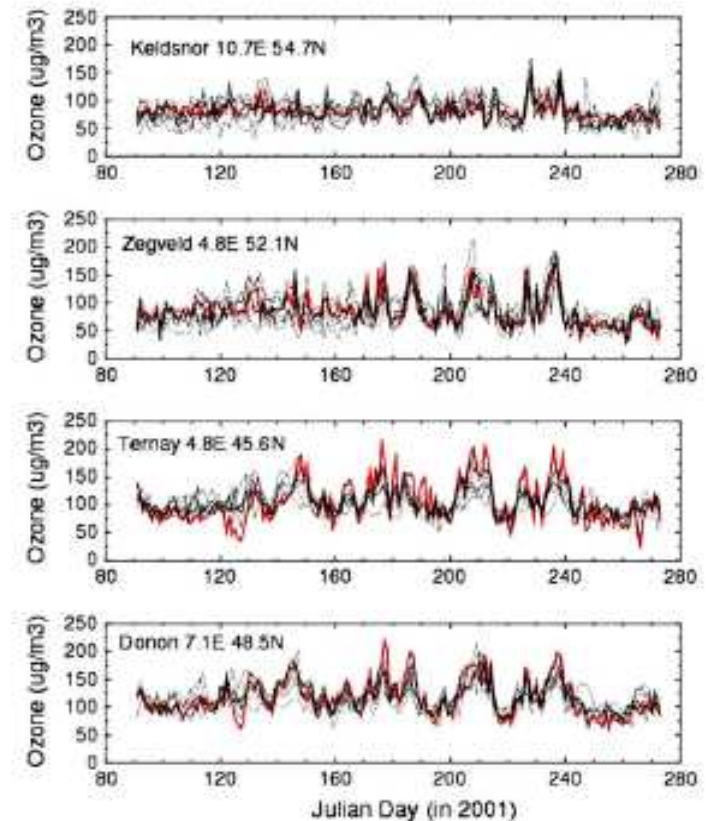
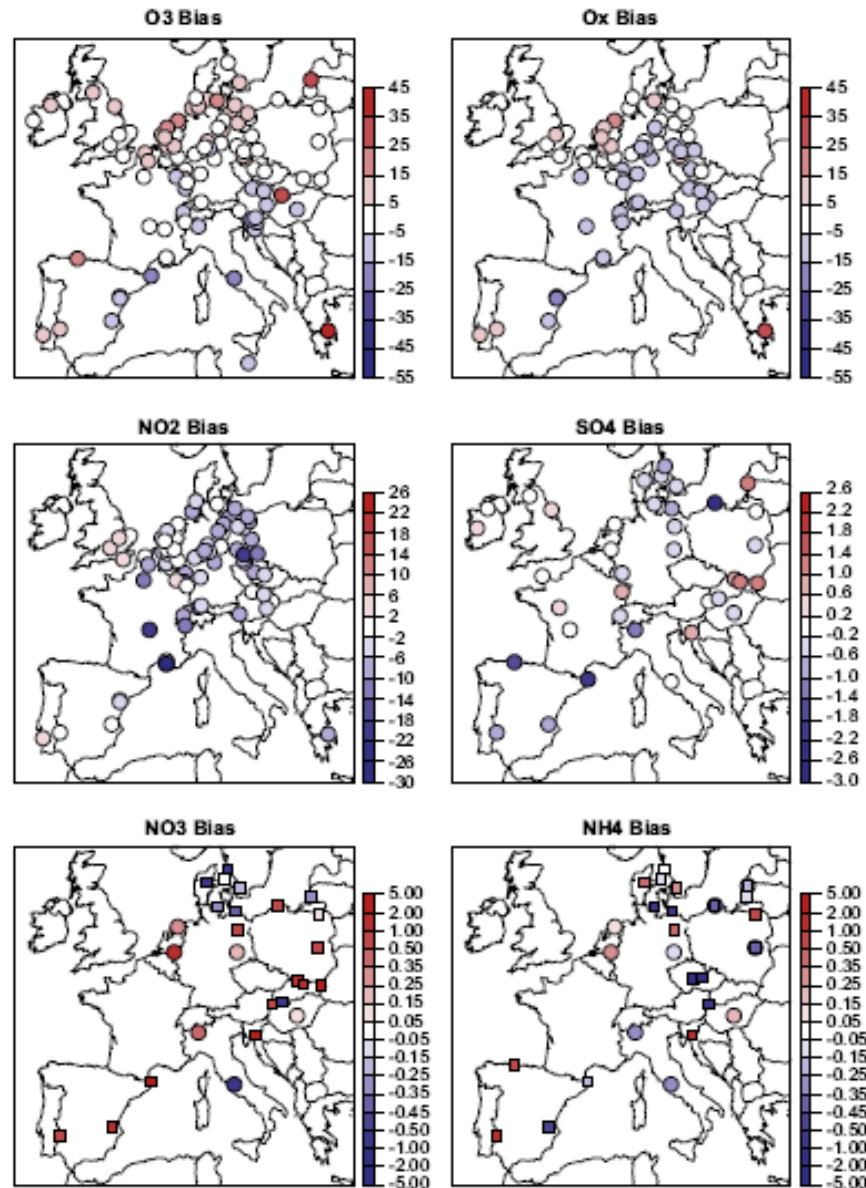
$$\text{RME} = \frac{\max(|C_{op} - C_{p_p}|)}{C_{op}}$$



Modelling quality objectives established by EU Directives

Pollutant	Quality indicator	Quality objective	Directive
SO ₂ , NO ₂ , NO _x	Hourly mean	50–60%	1999/30/EC
	Daily mean	50%	
	Annual mean	30%	
PM, Pb	Annual mean	50%	2000/69/EC
CO	8-hour mean	50%	
Benzene	Annual mean	50%	
Ozone	8-hour daily mean	50%	2002/03/EC
	1-hour average	50%	

NB. Los análisis se hacen temporal y espacialmente



Vautard et al, 2008 (AE)

Estudios de sensibilidad

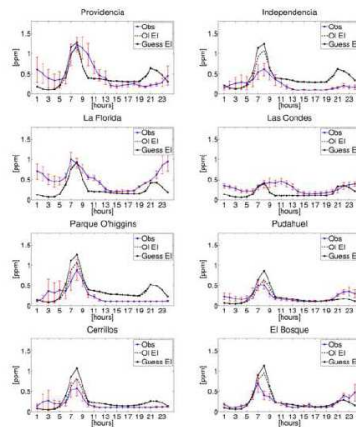
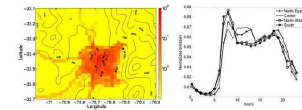
Análisis estocástico
(Monte Carlo)

Modelación inversa
(Adjunto)

Modelación **directa** e inversa de CO

Inventario de Emisiones

Campos de viento, temperatura, etc.



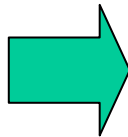
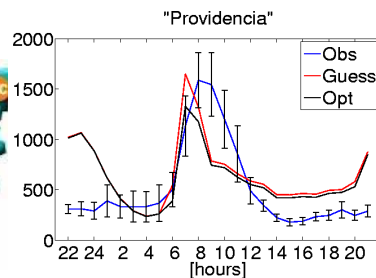
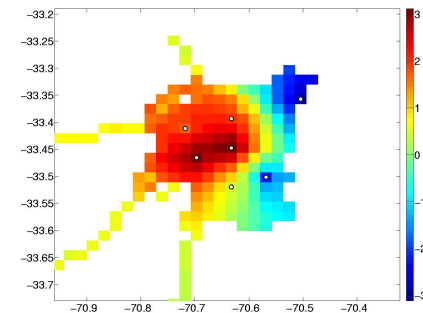
Modelo de dispersión

Datos de entrada → modelo → salida → evaluación de salidas
(comparación con observaciones)

Modelación directa e **inversa** de CO

Campos de viento,
temperatura, etc.

Inventario de
Emisiones



Modelo de dispersión

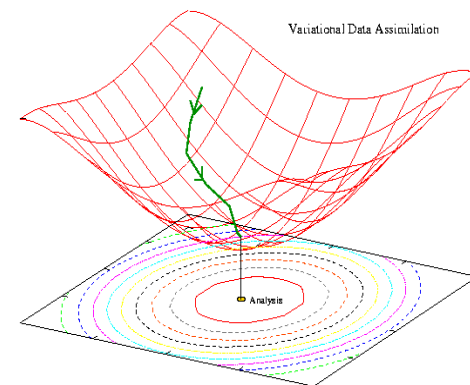
Observaciones → modelo → Selección de parámetros de entrada que optimizan el modelo (evaluación del modelo)



¿Cómo se resuelven los problemas inversos?

Camino 1: Buscar un conjunto óptimo de parámetros de entrada que maximice el acierto del modelo...

La búsqueda se hace por métodos variacionales o secuenciales



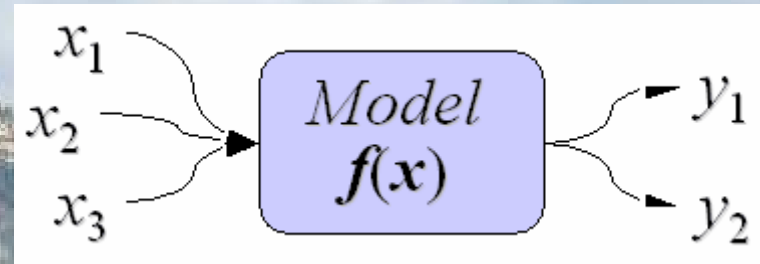
Se impone una “**condición de optimalidad**”, es decir, se define un funcional que minimice la distancia entre modelo y observaciones.

$$J(E_i) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{k=K} \left\| S_k^{\text{mod}}(E_i, i = 1, \dots, n) - S_k^{\text{obs}} \right\|^2$$

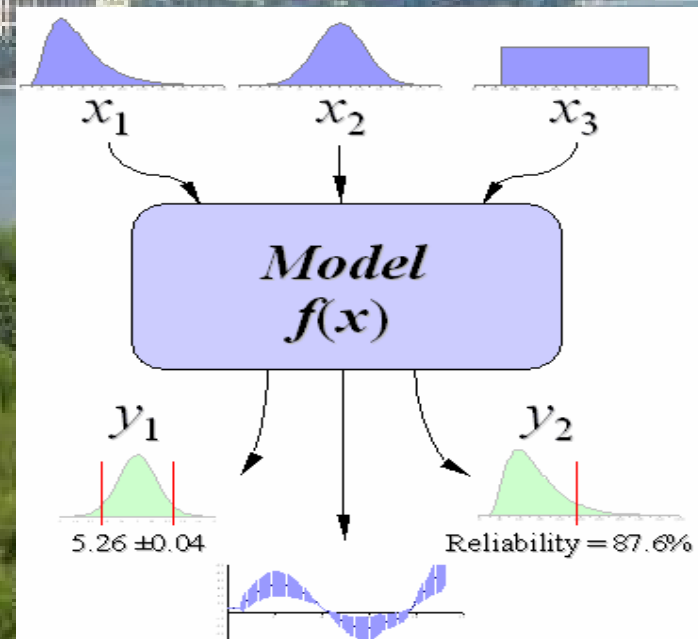
Técnica de Monte Carlo (*grosso modo*)

1. Definir el conjunto de posibles entradas (pdf): emisiones, tasas de reacción, condiciones iniciales, etc.
2. Generar entradas de modo aleatorio: usar estadísticas de las entradas o “criterio experto”
3. Computar en modo determinístico para cada distribución de entradas
4. Agregar el resultado de los cálculos

Modelo determinístico

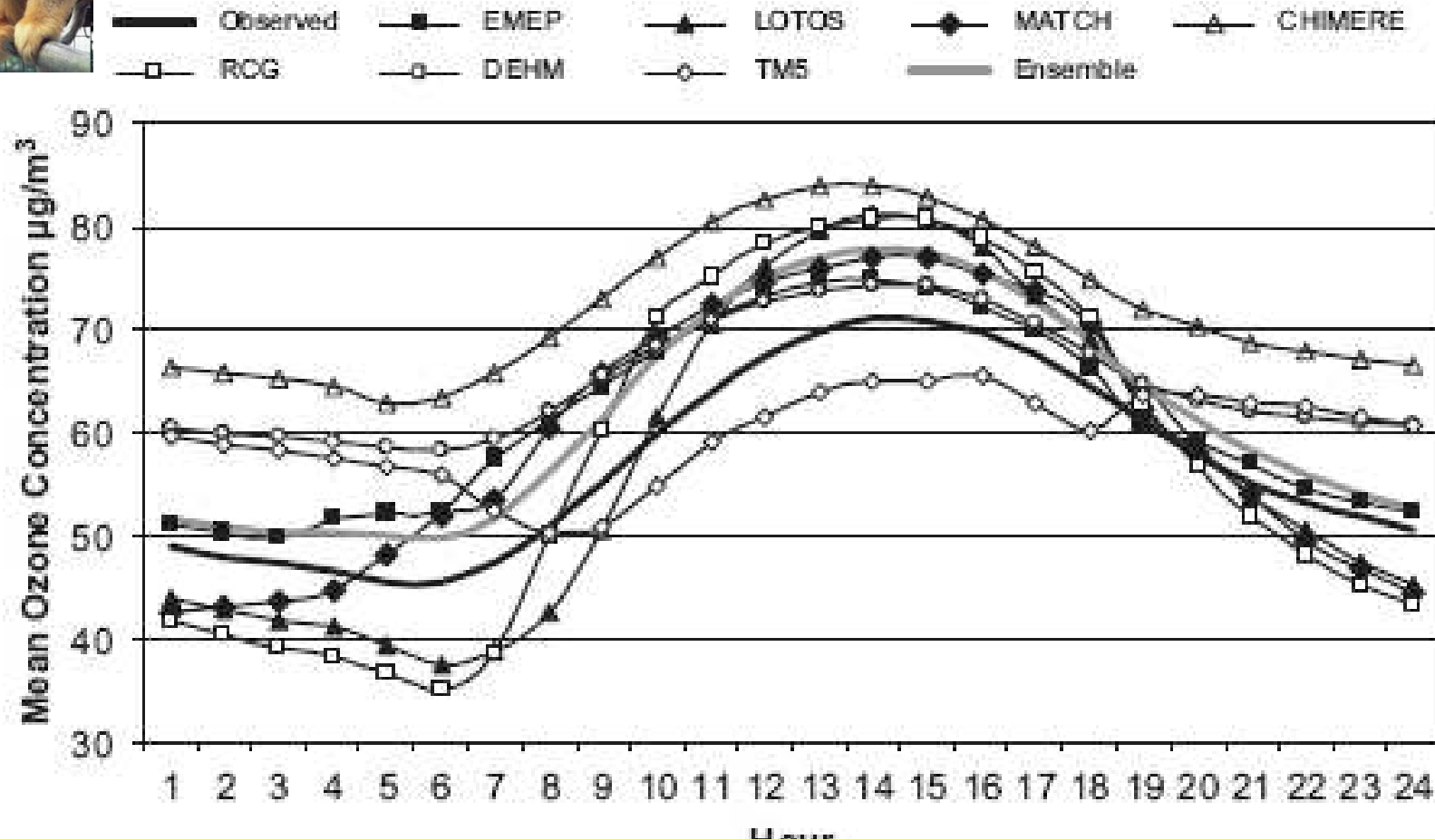


Modelo probabilístico



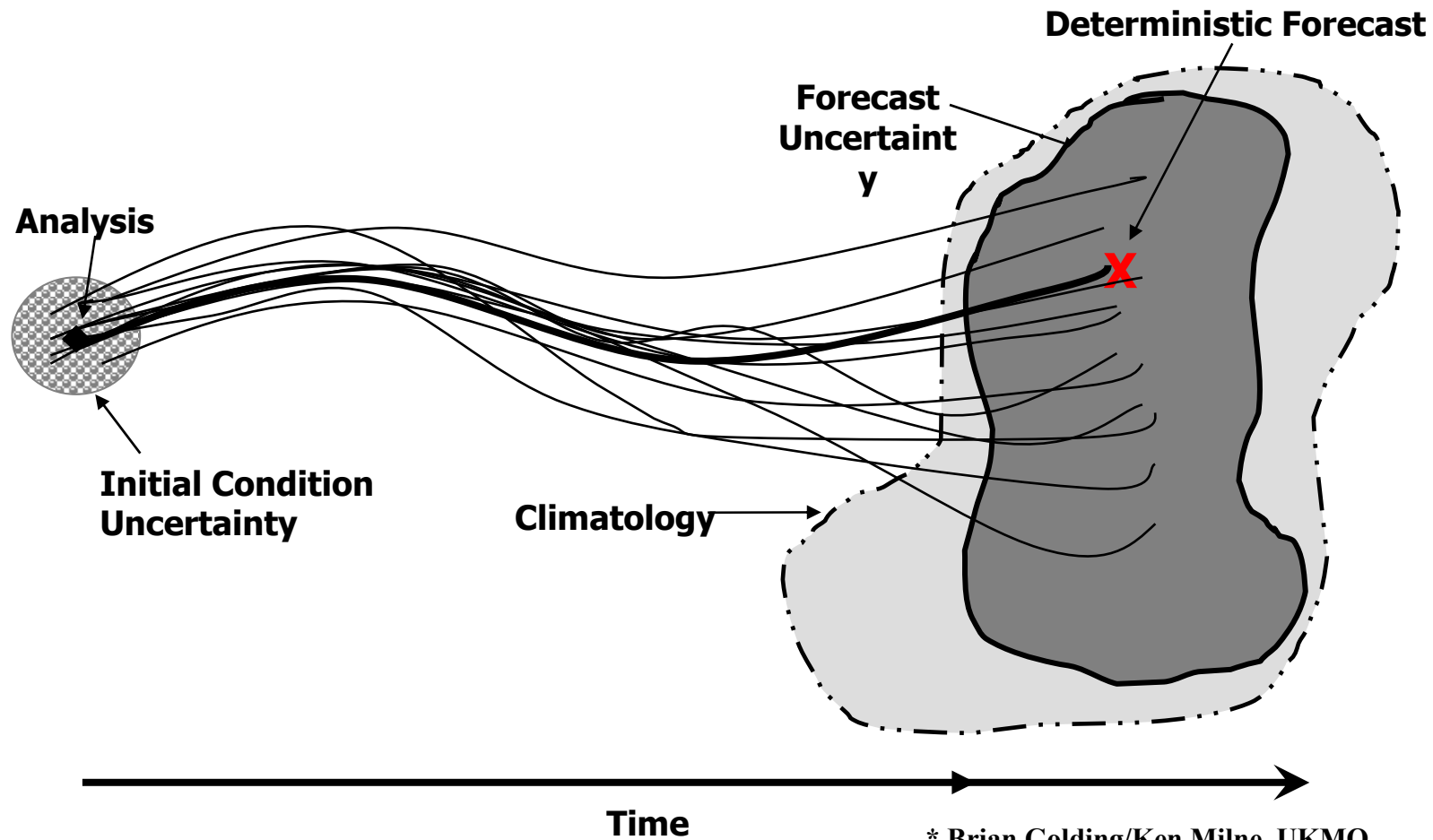


Intercomparación de modelos



- Sirve para determinar problemas con ciertos procesos o estudiar diferencias entre modelos
- ¿Qué, cómo, cuándo, dónde comparar?

“Ensemble Forecast” (Determinístico----Estocástico)



* Brian Golding/Ken Milne, UKMO

Se quiere dar cuenta de la varianza de las observaciones

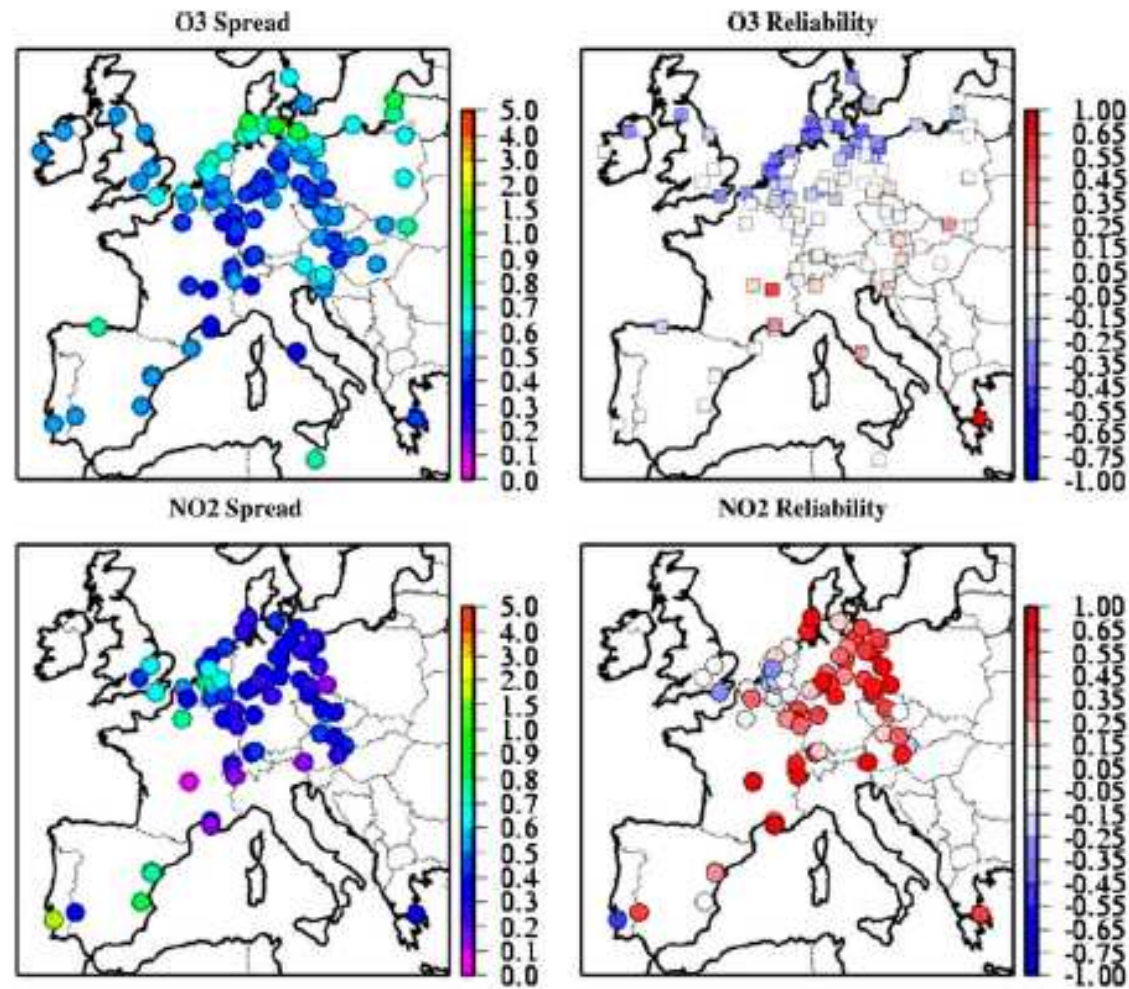
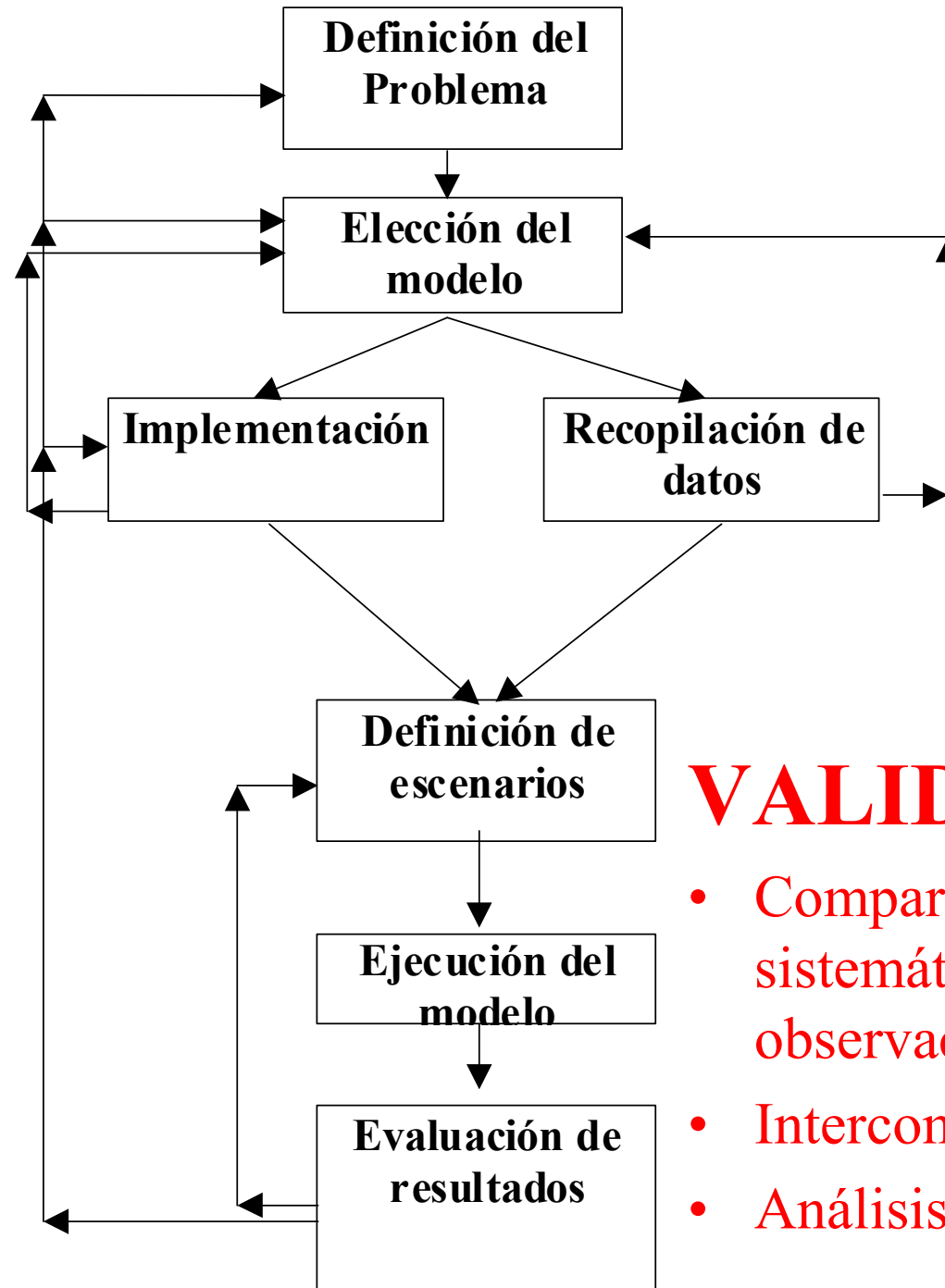


Fig. 6. Spatial distribution of the reliability index and normalized spread (see text), for ozone and NO₂.



VALIDACIÓN:

- Comparación sistemática contra observaciones
- Intercomparación
- Análisis de sensibilidad

“...La física, como cualquier otra ciencia, no se rige sólo por la inteligencia sino también por la razón...”

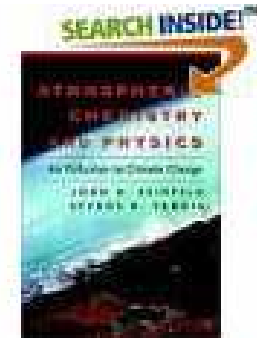


***Max Planck (1858-1947) en
“Wege zur physikalischen
Erkenntnis”***

Lecturas



- Capítulo 23 en: Seinfeld, J. y Pandis, S., 1998. *Atmospheric Chemistry and Physics From Air pollution to climate change*, J. Wiley and Sons, Inc.
- Capítulo 21 en: Jacobson, M. 1999: *Fundamentals of atmospheric modeling*, Cambridge University Press, Cambridge.



Otras lecturas

- Beekmann, M., and C. Derognat (2003), Monte Carlo uncertainty analysis of a regional-scale transport chemistry model constrained by measurements from the Atmospheric Pollution Over the Paris Area (ESQUIF) campaign, *J. Geophys. Res.*, 108(D17), 8559, doi:10.1029/2003JD003391.
- C. Borrego, A. Monteiro, J. Ferreira, A.I. Miranda, A.M. Costa, A.C. Carvalho, M. Lopes. Procedures for estimation of modelling uncertainty in air quality assessment *Environment International*, Volume 34, Issue 5, July 2008, Pages 613-620
- R. Vautard, M. Schaap, R. Bergström, B. Bessagnet, J. Brandt, P.J.H. Builtjes, J.H. Christensen, C. Cuvelier, V. Foltescu, A. Graff, A. Kerschbaumer, M. Krol, P. Roberts, L. Rouïl, R. Stern, L. Tarrason, P. Thunis, E. Vignati, P. Wind . Skill and uncertainty of a regional air quality model ensemble *Atmospheric Environment*, In Press, Corrected Proof, Available online 25 October 2008