Rev. Int. Contam. Ambient. 25 (2) 73-85, 2009

APLICACIÓN DE UN MODELO DE CALIDAD DEL AIRE DE SEGUNDA GENERACIÓN A LA ZONA METROPOLITANA DE GUADALAJARA, MÉXICO

Alberto MENDOZA[1] y Marisa R. GARCÍA[2]

[1] Departamento de Ingeniería Química, Tecnológico de Monterrey, Campus Monterrey, Ave. Eugenio Garza Sada 2501, Monterrey 64849, Nuevo León, México, mendoza.alberto@itesm.mx
[2] Centro de Calidad Ambiental, Tecnológico de Monterrey, Campus Monterrey, Ave. Eugenio Garza Sada 2501, Monterrey 64849, Nuevo León, México

(Recibido abril 2008, aceptado octubre 2008)

Palabras clave: modelación matemática, contaminación atmosférica, ozono, calidad del aire

RESUMEN

La Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG) registra continuamente períodos con niveles insalubres de calidad del aire. Una de las herramientas más poderosas para describir la dinámica de contaminantes atmosféricos en zonas urbanas son los modelos matemáticos tridimensionales que describen el transporte y transformación química de los mismos. En este trabajo se presenta una primera aplicación de uno de dichos modelos, del California/Carneige Institute of Technology (CIT), a la ZMG. El período de modelación seleccionado abarca del 16 al 18 de mayo de 2001, y el dominio de modelación cubre una región de 25,600 km^2 centrado en la ZMG. La evaluación estadística del desempeño del modelo indica que el CIT tuvo un mejor comportamiento durante los dos últimos días de modelación. En este período, respecto al O_3, el sesgo normalizado fue menor a 23.5 %, el error normalizado menor a 36.5 % y el índice diario de ajuste superior a 0.8. Asimismo, el modelo fue capaz de reproducir el pico de O_3 con un error inferior al 18 %. Estos valores, comparados con guías establecidas de evaluación de modelos de calidad del aire, indican un desempeño aceptable del modelo para el periodo simulado. No obstante, el desempeño respecto al CO fue regular, mientras que respecto al SO_2 y NO_x fue pobre, indicando que se requiere trabajo adicional para mejorar el desempeño general del modelo. Espacialmente, el modelo tiende a representar mejor la dinámica de contaminantes en la zona occidente de la ZMG, y temporalmente se apreciaron áreas de mejora en la modelación durante los períodos nocturnos.

Key words: mathematical modeling, air pollution, ozone, air quality

ABSTRACT

The Guadalajara Metropolitan Area (GMA) continuously registers periods of unhealthy levels of air quality. One of the most powerful tools available to describe the dynamics of air pollutants in urban areas are three-dimensional mathematical models that describe the transportation and chemical transformation of these. In this work, we present a first application of one of such models, the California/Carneige Institute of echnology (CIT), to the GMA. The modeling period selected goes from the 16^{th} to the 18^{th} of May, 2001; the modeling domain covers an area of 25,600 km^2 and is

centered in the GMA. The statistical model performance evaluation indicates that the CIT behaved better during the last two days of the simulation. In this period, regarding O_3, the normalized bias was less than 23.5 %, the normalized error less than 36.5 %, and the daily index of agreement was above 0.8. Further more, the model was capable of reproducing the O_3 peak with an error of less than 18 %. These values, compared to established guidelines on model evaluation, indicate an acceptable performance of the model for the simulated period. However, the performance of CO was not as good, and poor with respect to SO_2 and NO_x, indicating that additional work is needed to improve the overall performance of the model. Spatially, the model tended to represent better the dynamics of pollutants in the west region of the GMA, and temporally areas of improvement were detected in the simulation of nighttime periods.

INTRODUCCIÓN

Las tendencias de los índices de calidad del aire indican que los esfuerzos para controlar y abatir el problema de la contaminación del aire en las grandes ciudades de México han tenido un éxito parcial (INE 2000, Zuk *et al*. 2007). La dificultad en diseñar estrategias de control efectivas para reducir los niveles de contaminantes atmosféricos recae en la naturaleza altamente no lineal de la química atmosférica y la complejidad de las interacciones químicas y físicas que se dan en la atmósfera.

Con el fin de diseñar estrategias de control que sean efectivas en la reducción de los niveles de contaminantes atmosféricos, se han diseñado diversas herramientas matemáticas para establecer la relación que existe entre fuentes de emisión y receptores afectados. Entre las herramientas disponibles para estudiar la contaminación del aire a escalas urbanas y regionales, los modelos tridimensionales de calidad del aire formulados bajo marcos de referencia eulerianos han probado ser el método preferido (Russell y Odman 1993, Russell y Dennis 2000). En estos modelos, la ecuación de advección-difusión-reacción que describe el transporte, transformación química y destino final de contaminantes en la atmósfera se discretiza en un arreglo tridimensional de celdas computacionales y se resuelve numéricamente. Así, estos modelos pueden ser empleados para construir campos de concentración que varían con la posición y el tiempo, además de que sirven para definir explícitamente relaciones emisor-receptor para contaminantes y fuentes específicas. Esto último puede servir para hacer posteriormente un análisis costo-beneficio de estrategias de control de emisiones.

El objetivo general de este trabajo es realizar una primera aplicación de un modelo tridimensional de calidad del aire de segunda generación a la Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG) para investigar su capacidad de simular correctamente la dinámica de contaminantes en dicha zona bajo un periodo específico de tiempo. La ZMG es un foco de atención respecto a los altos niveles de contaminantes atmosféricos que se registran. Pese a la existencia de esta problemática desde hace ya algunas décadas, han sido pocos los esfuerzos realizados para aplicar técnicas avanzadas de modelación para incrementar el conocimiento sobre la dinámica de contaminantes en la zona. Uno de estos esfuerzos es el reportado por Davydova-Belitskaya *et al*. (2001), en donde los autores emplean un modelo bidimensional (y su adjunto) para estudiar el impacto de las emisiones industriales de SO_2 sobre la ZMG. Sin embargo, este estudio está limitado por el hecho de que se consideran un número limitado de fuentes de emisión puntuales, las condiciones meteorológicas se toman como promedios climatológicos, no se trata explícitamente la química atmosférica, y el modelo no resuelve el transporte vertical de contaminantes. Los resultados del presente trabajo son relevantes para sentar las bases de estudios posteriores que empleen técnicas de modelación atmosférica basados en modelos tridimensionales para estudiar la contaminación del aire urbano de la ZMG, por ejemplo, bajo diferentes condiciones meteorológicas.

Calidad del aire en la ZMG

La Zona Metropolitana de Guadalajara (ZMG) se ubica en el centro del estado de Jalisco y está formada por cuatro municipios: Guadalajara, Zapopan, Tlaquepaque y Tonalá, en donde habita cerca de 55 % de la población del estado: ~3.4 millones de habitantes (INEGI 2002). La extensión territorial de la ZMG es de más de 500 km^2.

Al igual que otras grandes ciudades de México y el mundo, la ZMG ha experimentado un acelerado crecimiento poblacional y, en consecuencia, las necesidades de suministro de energía se han ido incrementando junto con las actividades industriales y comerciales que sustentan la economía de la región.

Desafortunadamente, este crecimiento ha traído impactos negativos en el ambiente, como es la degradación de la calidad del aire. Entre las principales fuentes de emisión de contaminantes a la atmósfera se encuentra el parque vehicular, un número importante de industrias, comercios y servicios (INE 2000). La magnitud de este problema puede ilustrarse con el hecho de que, para el caso del ozono, de 1999 a 2005 se rebasó el límite máximo permitido del promedio de una hora de este contaminante 55 días en promedio cada año (Zuk *et al*. 2007). Asimismo, el máximo horario registrado durante ese mismo periodo estuvo en 0.231 ppmv (partes por millón volumen) en promedio. Los niveles de contaminación que se han registrado han tenido su efecto en la salud de la población. Por ejemplo, Ramírez-Sánchez *et al*. (2006) reportan que los niveles de CO y NO_2 en la ZMG muestran una correlación significativa con las infecciones agudas de las vías respiratorias en niños menores de cinco años.

Al igual que en otras regiones, no es únicamente el volumen de emisiones lo que afecta la calidad del aire de la región, sino también sus características fisiográficas y meteorológicas, ya que éstas determinan el transporte, transformación, dispersión y depositación de los contaminantes. La ZMG se encuentra en la cuenca del Valle del Río Grande de Santiago, en los valles de Atemajac y la Planicie de Tonalá, entre las zonas montañosas de la Sierra Madre Occidental y el Eje Neovolcánico. Las montañas que rodean la zona constituyen una barrera física natural para la circulación del viento, impidiendo el desalojo del aire contaminado fuera de la ZMG (Gobierno del Estado de Jalisco 1997). Una característica meteorológica típica de la ZMG es la afluencia de aire marítimo tropical durante la mayor parte del año. Sistemas anticiclónicos generados tanto en el Golfo de México como en el Océano Pacífico también influyen sobre la región, ocasionando gran estabilidad atmosférica que inhibe el mezclado vertical del aire. Además, debido a su latitud (20°N), recibe una abundante radiación solar, situación que hace que la atmósfera de la ZMG sea altamente fotorreactiva (Gobierno del Estado de Jalisco 1997).

En verano, aire cálido y húmedo procedente del Pacífico, del Golfo de México y del Mar Caribe provoca altas temperaturas que favorecen el movimiento vertical del aire, lo que disminuye la presencia, intensidad y espesor de las inversiones térmicas. Adicional a esto, la humedad aumenta debido al constante avance de ondas tropicales, lo que provoca lluvias intensas, cielos nublados y vientos de componente oriental. El viento dominante proviene del Oeste con 15.5 % de la frecuencia total, siguiéndole el viento proveniente del Este con un 7.5 %, con velocidades que van de 5 a 20 km/h y en forma temporal se llegan a presentar velocidades de 21 a 35 km/h. Existen también periodos de vientos muy débiles (menores a 4 km/h) y ausencia de los mismos en 44.3 % de la frecuencia total, lo que claramente indica el gran potencial de acumulación de los contaminantes por falta de ventilación. Davydova-Belitskaya *et al*. (1999) presentan una descripción más detallada de los cambios que el microclima de la ZMG ha experimentado en las últimas décadas del siglo pasado.

El modelo de calidad del aire CIT

El modelo de calidad del aire empleado en este trabajo es el California/Carnegie Institute of Technology (CIT) versión 3.0, el cual es capaz de simular el transporte, reacción y remoción por depositación en seco de contaminantes gaseosos emitidos en una determinada cuenca atmosférica. El CIT considera las condiciones meteorológicas, topográficas y de uso de suelo locales para efectuar sus cálculos. El modelo simula el transporte y transformación de los contaminantes del aire sobre un volumen determinado, dividiendo el volumen en un arreglo de celdas tanto horizontales como verticales, las cuales forman una malla en tres dimensiones.

La formulación matemática del CIT se encuentra reportada en la literatura (McRae *et al*. 1982a, Russell *et al*. 1988, Harley *et al*. 1993, Mendoza y Graniel 2007). Aquí se presenta una breve descripción del mismo. El CIT está basado en la ecuación atmosférica de trasporte y formación fotoquímica de contaminantes atmosféricos:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla\left(\mathbf{u}c_i\right) = \nabla\left(\mathbf{K}\times\nabla c_i\right) + f_i + S_i, i = 1,\ldots, N \qquad (1)$$

donde c_i ($\mathbf{x}$, t) representa la concentración de la especie i, $\mathbf{u}$ es el campo de flujo advectivo (campo de vientos), $\mathbf{K}$ ($\mathbf{x}$, t) es un tensor de segundo orden para representar la difusividad turbulenta, f_i (c_i,…, c_N; T, t) es el término de reacción química en fase gaseosa, S_i ($\mathbf{x}$, t) es el término de emisiones provenientes de fuentes puntuales, T es la temperatura ambiente, N es el número total de especies, $\mathbf{x}$ (x, y, z) es el vector de posición en coordenadas eulerianas y t es el tiempo. Las emisiones de área E_i ($\mathbf{x}$, t) entran en la formulación a través de la condición de frontera en la superficie:

$$-K_{zz}\frac{\partial c_i}{\partial z} + v_i^g c_i = E_i, \text{ en } z = 0 \qquad (2)$$

donde, v_i^g (**x**, *t*) es la velocidad de depositación en seco de la especie *i*. La condición de frontera en z = *H*, donde *H* es la altura total del dominio, define un gradiente de concentración igual a cero para cada especie química. Las condiciones de frontera en las caras laterales del dominio son: 1) en caso de flujo al interior del dominio, concentraciones prescritas de la especie *i* (c_i^b), y 2) en caso de flujo hacia afuera del dominio, gradiente de concentración de la especie *i* igual a cero. La formulación se completa definiendo un campo de concentraciones inicial c_i (**x**, 0) = $c_i°$ (**x**).

El CIT utiliza un método de separación de operadores para resolver numéricamente la ecuación (1), de tal manera que el transporte horizontal y vertical se resuelve con diferentes operadores secuenciados. En este estudio se exploran dos esquemas numéricos para resolver el transporte horizontal. El primero es un esquema implícito que consiste en un método de elementos finitos (MEF) de cuarto orden para el paso de advección, seguido de un filtro no lineal, y terminando con un esquema explícito de diferencias finitas para el paso de difusión (McRae *et al*. 1982b). El segundo es un esquema de advección parabólico, *piecewise parabolic method* (PPM) (Srivastava *et al*. 2000), seguido también de un esquema explícito de diferencias finitas para el paso de difusión. Ambos métodos conservan la masa (Odman 1998), lo cual es una propiedad muy deseable en este tipo de aplicaciones. Sin embargo, la solución obtenida a través de PPM es monotónica lo cual tiende a hacerlo superior al primer método (Odman 1998). Las aplicaciones anteriores del CIT están dominadas por el uso del primer método (e.g. Harley *et al*. 1993, McNair *et al*. 1996, Khan 1999, Mendoza-Domínguez *et al*. 2000, Mendoza-Domínguez y Russell 2001). Aquí se comparan las soluciones obtenidas con ambos métodos con el fin de identificar si alguno es superior al otro para la aplicación considerada, tomando en cuenta su capacidad de modelar adecuadamente observaciones conocidas en el dominio de modelación. El transporte vertical, depositación en seco y transformaciones químicas se combinan en un solo operador para tomar ventaja de las escalas de tiempo similares que gobiernan estos procesos. Este operador se resuelve usando un esquema híbrido de integración para sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias rígidas (Young y Boris 1977).

Respecto al tratamiento de las transformaciones químicas, se emplea el mecanismo SAPRC90 desarrollado por Carter (1990), el cual es, en esencia, un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias que describen la cinética química (cambio de concentración de cada especie química con respecto al tiempo) de las principales reacciones fotoquímicas que ocurren en fase gaseosa en la atmósfera. La versión empleada del mecanismo SAPRC90 contempla 89 especies químicas (incluyendo CO, NO, NO_2, SO_2, O_3 y una variedad de compuestos orgánicos volátiles y radicales libres) y modela 207 diferentes reacciones. La versión empleada del CIT no contempla la dinámica de aerosoles atmosféricos (los modelos de tercera generación o "una atmósfera" sí lo hacen): únicamente ajusta los valores de las concentraciones de HNO_3 y NH_3 en fase gaseosa después del paso de cinética química, resolviendo el equilibrio químico entre estas dos especies y el nitrato de amonio en fase aerosol (Russell *et al*. 1988). La pérdida de material a la superficie de cualquier especie química está sujeta exclusivamente a la depositación en seco, la cual se trata empleando un método basado en resistencias superficiales (Wesely 1989).

Dominio y episodio de modelación

El dominio geográfico de modelación que se emplea en este trabajo se centra alrededor de la ZMG (**Fig. 1**). La malla computacional tiene una extensión

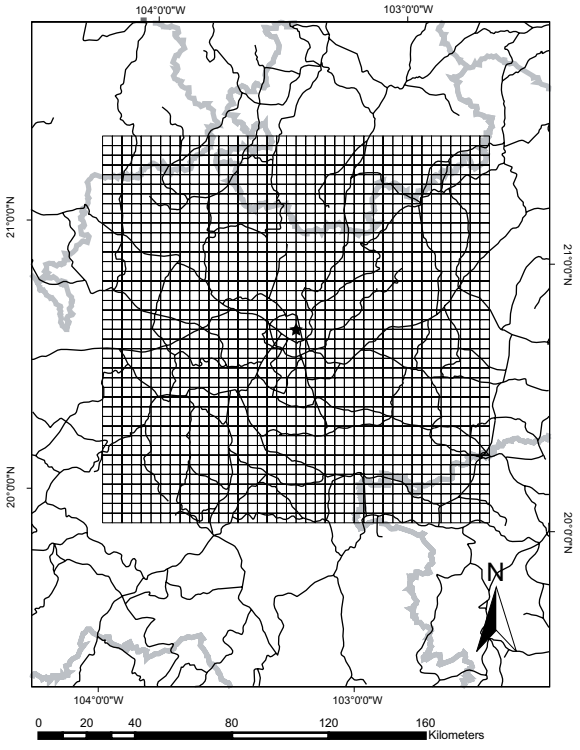

Fig. 1. Definición del dominio de modelación alrededor de la ZMG (★), incluyendo coordenadas geográficas correspondientes. Como referencia se presentan los límites estatales (líneas grises) y las principales vías de comunicación

de 160 km de Este a Oeste y 160 km de Norte a Sur, con una resolución de cada celda de 4 × 4 km para tener una configuración horizontal de 40 × 40 celdas. La altura (sobre el nivel del suelo) del dominio es de 3100 m, dividido en seis capas de distintos grosores (30, 70, 200, 400, 800 y 1600 m). El espesor de las capas fue seleccionado considerando que los gradientes de concentración en la vertical son más pronunciados cerca del suelo (requiriendo mayor resolución espacial en esta sección), mientras que en la troposfera libre los gradientes son menos pronunciados (requiriendo menor resolución espacial) (McRae y Seinfeld 1983). Como caso de estudio se tomó un episodio con altos niveles de ozono en la ZMG ocurrido del 16 al 18 de mayo de 2001. En este período, la máxima concentración de O_3 reportada fue de 150 ppbv. La aplicación del CIT en este estudio comenzó con la simulación desde el 14 de mayo de 2001, con el fin de emplear los dos primeros días para estabilizar la respuesta del modelo y minimizar el impacto de las condiciones iniciales empleadas para inicializar la solución del modelo. Este procedimiento es típico en estudios que emplean este tipo de modelos de calidad del aire (e.g. Harley *et al*. 1997).

Las cuatro categorías de archivos de entrada más relevantes que utiliza el simulador para calcular la dispersión de contaminantes son: 1) condiciones iniciales y de frontera, 2) meteorología, 3) uso del suelo y 4) emisiones a la atmósfera. La información necesaria para crear dichos archivos se obtuvo del Instituto Nacional de Ecología (INE), el Instituto Nacional de Estadística, Geografía e Informática (INEGI), el Instituto de Astronomía y Meteorología de la Universidad de Guadalajara y el Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Occidente (García Meza 2003).

Para el caso particular de la construcción de los campos meteorológicos (velocidad y dirección de viento, temperatura ambiente y humedad absoluta) y del campo de condiciones iniciales, se empleó un modelo de diagnóstico (Goodin *et al*. 1979, 1980). Las condiciones iniciales y de frontera se especificaron para condiciones de "aire limpio" típico de zonas rurales (NRC 1991). Los campos de radiación solar total y radiación ultravioleta se establecieron considerando cielo completamente despejado (que fue el caso para el episodio simulado). La altura de la capa de mezcla se consideró espacialmente homogénea en todo el dominio, pero variable hora a hora.

Emisiones a la atmósfera

El inventario de emisiones empleado en este estudio está basado en el reportado por el INE para el año base 1995 (Gobierno del Estado de Jalisco 1997). El inventario está segregado por fuente de emisión y reporta emisiones anualizadas para toda la ZMG; asimismo tuvo que ser escalado para ser compatible con el año base de modelación considerado (2001). Por último, tuvo que segregarse espacial y temporalmente para poder ser alimentadas las emisiones en cada celda computacional, para cada hora de simulación.

Las emisiones a ser alimentadas al dominio computacional se estimaron bajo las siguientes suposiciones:

- Las emisiones de fuentes superficiales (móviles y fijas) en la ZMG son proporcionales con la población. Esta suposición se aplicó para poder escalar el inventario de su año de cálculo (1995) al año de aplicación en este trabajo (2001).
- Los factores de emisión son homogéneos en todo el dominio geográfico de modelación. Esta suposición sirve para distribuir las emisiones espacialmente en el dominio. Cabe señalar que el dominio de modelación cubre municipios que no pertenecen a la ZMG.
- No existe variación estacional de las emisiones. Esta suposición sirve para calcular las emisiones diarias a partir de las emisiones anualizadas.

Siguiendo la primera suposición, se obtuvieron "factores de emisión" en términos de toneladas emitidas del contaminante *i* por año por habitante. Una vez obtenidos estos factores, se calcularon las emisiones a la atmósfera para cada celda computacional del dominio de modelación con base en la población que existía en cada celda computacional de acuerdo a datos de 2001. Esto aplicó para celdas ubicadas en municipios que no pertenecían a la ZMG. Para el caso de los municipios del área metropolitana, las emisiones se calcularon con los factores correspondientes y se distribuyeron espacialmente de acuerdo a la densidad esperada en la ubicación de fuentes fijas y fuentes puntuales. Esto se llevó a cabo al tener una resolución espacial suficientemente buena de la malla computacional dentro de la ZMG.

Una vez que se obtuvo la distribución espacial de las emisiones, se procedió a su asignación temporal, ya que el CIT necesita que las emisiones sean alimentadas de forma horaria celda por celda. Las emisiones diarias por celda se obtuvieron simplemente de dividir las emisiones anuales previamente calculadas entre 365. Sin embargo, al pasar de emisiones diarias a horarias éstas no se prorratearon de manera equitativa ya que se sabe que la actividad de las fuentes no es igual en toda hora del día, e incluso cambia de fuente a fuente. Por ejemplo, se

sabe que las emisiones por fuentes móviles presentan ciclos variables debidos principalmente a rutinas de vida. A efecto de modelar esta variabilidad temporal de las emisiones por fuente, se asoció a cada fuente contemplada en el inventario de emisiones original un perfil temporal de emisión de acuerdo a lo recomendado por la Agencia de Protección Ambiental de los EUA (USEPA, por sus siglas en inglés) a través de su Red de Transferencia de Tecnología (www.epa.gov/ttn/chief/emch/temporal/index.html). El perfil temporal de emisión representa la fracción de la emisión diaria que ocurre hora a hora. El **cuadro I** presenta los códigos de los perfiles temporales que se asociaron a cada fuente de emisión y que se pueden encontrar en la base de datos indicada de la USEPA, mientras que la **figura 2** presenta la ponderación temporal que aplica cada perfil a las emisiones diarias.

Finalmente, es necesario hacer una especiación química de las emisiones para que puedan ser procesadas por el mecanismo fotoquímico del modelo. Las emisiones de CO son alimentadas tal cual al CIT. Sin embargo, las emisiones de NO_x ($NO+NO_2$), SO_2 y compuestos orgánicos volátiles (COV) requieren ser especiadas. Las emisiones de NO_x varían en su contenido de NO y NO_2 dependiendo de la fuente. Asimismo, una fracción de las emisiones de SO_2 es realmente SO_3. El caso más complejo son las emisiones de COV, las cuales varían fuertemente en su contenido de fuente a fuente. Aún más, hay ciertas especies químicas que son tratadas tal cual por el mecanismo químico (por ejemplo, el benceno) mientras que otras se agregan en pseudoespecies químicas con reactividad fotoquímica similar y con productos de reacción similares (por ejemplo, los alcanos y alquenos superiores se agregan en pseudoespecies) (Carter 1990). La especiación química desarrollada en este último paso del preprocesamiento del inventario de emisiones se basó en los perfiles de especiación reportados por la USEPA en la base de datos SPECIATE (Hsu 2006). Cada perfil de especiación indica las proporciones de cada especie o pseudoespecie química que finalmente conforman las emisiones que se alimentarán al CIT. Los datos que se encuentran en SPECIATE son propios de información recabada en los EUA de procesos reales; no incluye datos particulares de fuentes de emisión mexicanas. Al no tener información particular para México, su uso implica un cierto grado de incertidumbre en la información alimentada. El beneficio de usar SPECIATE es que contiene todas las fuentes convencionales de emisión con información de perfiles promedio de especiación sugeridos. Dicha información es escasa o nula en bases de datos mexicanas. El **cuadro I** presenta la

CUADRO I. TIPOS DE FUENTES CON SUS RESPECTIVOS CÓDIGOS DE PERFILES DE ESPECIACIÓN QUÍMICA Y DISTRIBUCIÓN TEMPORAL DE EMISIONES

Categoría en el inventario de emisiones original	Perfil de especiación química[a]	Perfil de distribución temporal
INDUSTRIA		
Industria química	600	24
Minerales metálicos	600	24
Minerales no metálicos	600	24
Productos vegetales y animales	600	24
Madera y derivados	600	24
Productos de consumo alimenticio	600	24
Industria del vestido	600	24
Productos de consumo varios	600	24
Productos de consumo de vida media	600	24
Productos de consumo de vida larga	600	24
Artes gráficas	783	24
Productos de impresión	783	24
Productos metálicos	600	24
Otros	600	24
SERVICIOS		
Lavado y desengrase	515	37
Consumo de solventes	783	37
Transporte y venta de gasolina	710	56
Mercadeo y distribución de gas LP	520	37
Operaciones de lavado en seco (tintorerías)	516	37
Superficies arquitectónicas	717, 196, 600	37
Panaderías	211	38
Pintura automotriz	783	37
Pintura de tránsito	783	33
Esterilización en hospitales	785	24
Uso de asfalto	715	57
Combustión en hospitales	600	24
Combustión residencial	3, 4	38
Combustión comercial/ institucional	3	33
TRANSPORTE		
Autos particulares	500[b]; 502, 709, 710[c]	50
Taxis	500; 502, 709, 710	50
Camiones de pasajeros	561	56
Camiones de carga	561	56
Motocicletas	710	56
Pick-up	709, 527	56

[a] En caso de reportar más de un perfil, se empleó un perfil compuesto con base en los perfiles indicados. [b] Aplica para la especiación de NO_x y SO_2. [c] Aplican para la especiación de COV

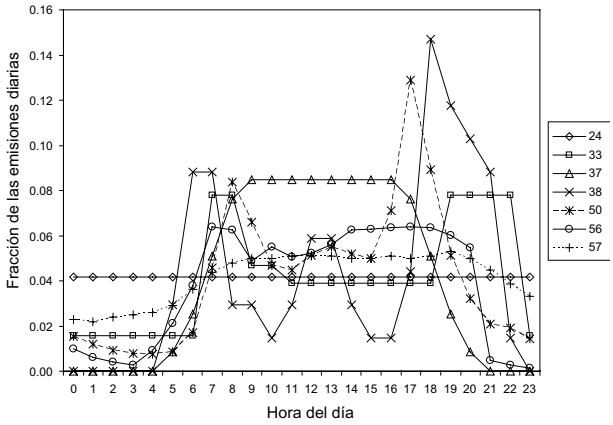

Fig. 2. Perfiles de distribución temporal empleados. Los códigos de los perfiles corresponden a aquéllos reportados en el **cuadro** I

asociación del perfil de especiación que se realizó para cada fuente del inventario de emisiones.

Finalmente, el CIT requiere que se haga distinción en las emisiones dependiendo de su fuente, de modo que se alimentan al modelo de forma separada fuentes puntuales y fuentes superficiales (o de área). Las emisiones por fuentes superficiales son las que provienen de fuentes móviles y fuentes fijas de baja capacidad, mientras que las emisiones puntuales representan chimeneas de plantas de gran tamaño con un nivel de emisión importante. Por falta de suficiente información en el inventario de emisiones original, para efectos de este trabajo se consideró que todas las emisiones eran superficiales.

RESULTADOS

El desempeño del modelo de calidad del aire CIT se evalúo estadísticamente con el fin de estimar qué tan certeramente reproduce el caso simulado. A tal efecto, se compararon las concentraciones simuladas por el modelo contra las mediciones reportadas por las ocho estaciones de monitoreo de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico de la ZMG (**Fig. 3**). La comparación se llevó a cabo para las especies contaminantes reportadas por la red de monitoreo: CO, NO_x, O_3 y SO_2. Los estadísticos para NO y NO_2 también se computaron, sin embargo no se presentan por brevedad. Como referencia, dichos estadísticos siguen la tendencia reportada aquí para NO_x. Los estadísticos computados fueron los recomendados por Tesche *et al*. (1990), mismos que han sido adoptados por la USEPA en sus documentos guía para modelaciones fotoquímicas (e.g. Doll *et al*. 1991).

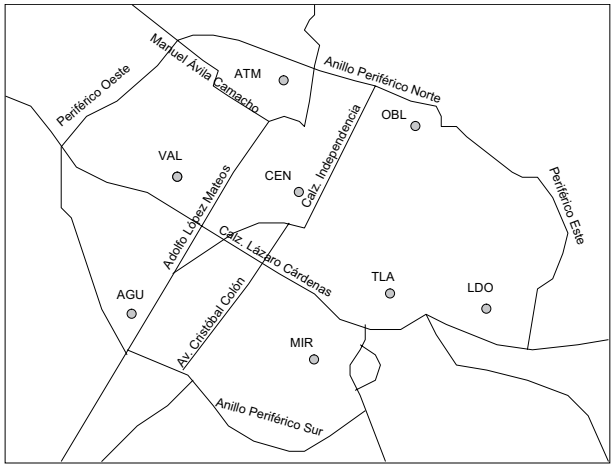

Fig. 3. Localización de las estaciones de monitoreo (◉) que conforman la Red Automática de Monitoreo Atmosférico de la ZMG. AGU: estación Águilas; ATM: estación Atemajac; CEN: estación Centro; LDO: estación Loma Dorada; MIR: estación Miravalle; OBL: estación Oblatos; TLA: estación Tlaquepaque; VAL: estación Vallarta

Los **cuadros II** y **III** reportan la evaluación estadística del desempeño del CIT empleando los dos modelos de transporte horizontal mencionados con anterioridad. Para el caso particular del ozono se empleó una concentración de corte de 60 ppbv, lo cual es típico en este tipo de evaluaciones (e.g. Doll *et al*. 1991, Harley *et al.* 1993). No se emplearon puntos de corte para el resto de las especies. Detalles de la definición de los estadísticos que se calcularon aquí se pueden encontrar en el Apéndice incluido al final de este artículo. Los valores reportados indican globalmente una gran similitud entre ambas aplicaciones, siendo la aplicación que emplea PPM ligeramente superior, considerando los valores del índice diario de ajuste como métrica y en particular los de los dos últimos días. De manera general también se aprecia un sesgo negativo consistente en los valores simulados de los niveles de CO, NO_x y SO_2 respecto a los observados. Es decir, el modelo reporta concentraciones inferiores a las que en realidad se observaron.

Con el fin de valorar más detalladamente el desempeño del modelo, se compararon los estadísticos obtenidos para O_3 con valores límite que se consideran para establecer una simulación como aceptable (Doll *et al*. 1991). Cabe mencionar que no existen guías parecidas para otras especies. Dichas guías establecen que: 1) el error en la estimación del pico de concentración diario debe ser menor a ±20 %, 2) el sesgo normalizado debe ser inferior a ±15 %, y 3) el error normalizado debe de ser inferior a 35 %.

CUADRO II. EVALUACIÓN ESTADÍSTICA DEL DESEMPEÑO DEL CIT EMPLEANDO EL ESQUEMA ADVECTIVO MEF

Estadísticos [a]	16 Mayo	17 Mayo	18 Mayo
		O_3[b]	
EEPCD, %	18.9	−14.7	17.7
Sesgo normalizado, %	53.2	11.7	23.5
Error normalizado, %	61.7	18.1	31.6
ECMN	0.33	0.05	0.15
RCECM (ppbv)	55.5	37.7	32.6
$RCECM_s$ (ppbv)	45.6	35.4	25.4
$RCECM_n$ (ppbv)	31.6	13.0	20.6
IDA	0.64	0.81	0.87
		CO	
Sesgo normalizado, %	36.6	−33.2	−25.2
Error normalizado, %	69.8	56.4	57.7
RCECM (ppmv)	1.99	1.39	1.30
$RCECM_s$ (ppmv)	0.76	1.16	0.99
$RCECM_n$ (ppmv)	1.84	0.77	0.84
IDA	0.45	0.52	0.60
		NO_x	
Sesgo normalizado, %	−29.1	−62.8	−51.1
Error normalizado, %	72.6	69.6	65.1
RCECM (ppbv)	51.2	42.4	42.0
$RCECM_s$ (ppbv)	41.1	40.4	39.0
$RCECM_n$ (ppbv)	30.5	12.7	15.7
IDA	0.40	0.46	0.48
		SO_2	
Sesgo normalizado, %	52.1	−10.5	−10.5
Error normalizado, %	102.0	65.9	63.6
RCECM (ppbv)	7.8	5.5	8.1
$RCECM_s$ (ppbv)	5.9	4.9	7.4
$RCECM_n$ (ppbv)	5.1	2.6	3.2
IDA	0.36	0.43	0.41

[a]*EEPCD*: Error en la estimación del pico de concentración diario; *ECMN*: Error cuadrado medio normalizado; *RCECM*: Raíz cuadrada del error cuadrado medio; $RCECM_s$ y $RCECM_{ns}$: componentes sistemático y no sistemático del *RCECM*, respectivamente. [b]Valor de corte para el ozono: 60 ppbv (ver texto para detalles)

CUADRO III. EVALUACIÓN ESTADÍSTICA DEL DESEMPEÑO DEL CIT EMPLEANDO EL ESQUEMA ADVECTIVO PPM[a]

	O_3		
	16 Mayo	17 Mayo	18 Mayo
EEPCD, %	28.7	−7.1	16.4
Sesgo normalizado, %	55.1	10.2	20.3
Error normalizado, %	66.1	19.3	36.5
ECMN	0.34	0.07	0.19
RCECM (ppbv)	59.0	34.8	31.1
$RCECM_s$ (ppbv)	47.7	30.7	20.7
$RCECM_n$ (ppbv)	34.8	16.4	23.2
IDA	0.61	0.86	0.89
		CO	
Sesgo normalizado, %	30.2	−34.1	−26.8
Error normalizado, %	65.6	58.6	60.6
RCECM (ppmv)	2.02	1.39	1.33
$RCECM_s$ (ppmv)	0.64	1.10	1.01
$RCECM_n$ (ppmv)	1.91	0.86	0.86
IDA	0.48	0.55	0.60
		NO_x	
Sesgo normalizado, %	−28.1	−61.2	−51.1
Error normalizado, %	77.8	70.4	67.0
RCECM (ppbv)	54.6	42.0	43.1
$RCECM_s$ (ppbv)	40.9	39.4	39.7
$RCECM_n$ (ppbv)	36.2	14.6	16.9
IDA	0.39	0.47	0.47
		SO_2	
Sesgo normalizado, %	50.7	−10.2	−13.1
Error normalizado, %	105.4	72.6	66.9
RCECM (ppbv)	8.1	5.7	8.1
$RCECM_s$ (ppbv)	5.8	4.8	7.3
$RCECM_n$ (ppbv)	5.6	3.0	3.5
IDA	0.38	0.44	0.42

[a]Ver el **cuadro II** para definiciones de los estadísticos y valor de corte para O_3

Bajo estas guías se puede establecer que el modelo hace un trabajo aceptable para los dos últimos días de modelación, mas no para el primero en donde se tiende a sobrestimar las concentraciones de O_3. Esta conclusión es válida para ambos esquemas de transporte horizontal empleados.

La **figura 4** presenta de manera gráfica el desempeño global del modelo. Dicha figura corrobora que las aplicaciones con diferentes esquemas numéricos para tratar el transporte horizontal dan resultados similares, que las concentraciones de O_3 tienden a estar sobrestimadas, y que las del resto de las especies analizadas tienden a estar subestimadas. Asimismo, las parejas de observación/predicción para O_3 tienden a estar en un área acotada por las líneas 1:2 y 2:1 (implicando un desempeño razonable tal como se indicó arriba), en menor grado para CO, y la dispersión es mucho mayor para el caso de NO_x y SO_2, indicando un desempeño pobre en algunos casos. Estos resultados sobre el desempeño del modelo dejan claro que existen áreas de mejora en su aplicación, siendo el inventario de emisiones una de las fuentes de error más común que otros estudios han encontrado (Mendoza-Domínguez y Russell 2001).

Con el fin de indagar sobre el desempeño espacial del modelo, se analizó estación por estación la correlación obtenida de una regresión lineal entre valores observados y simulados. Los valores de los coeficientes de correlación (R^2) se presentan en el **cuadro IV**. Se observa que para O_3 la correlación tiende a ser pobre particularmente en las estaciones

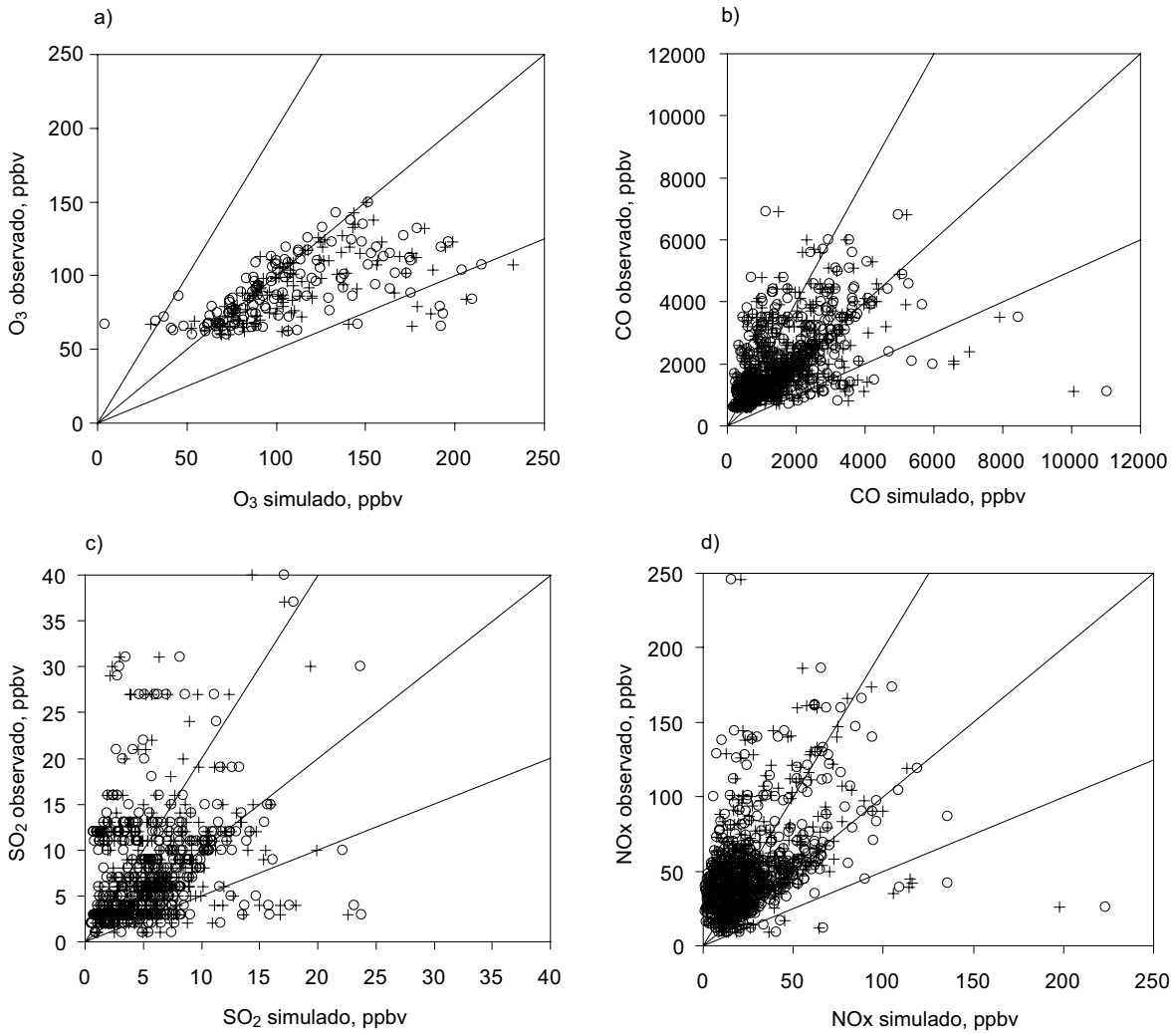

Fig. 4. Gráficas de dispersión para las parejas de valores de concentración observados y predichos: a) O_3, b) CO, c) SO_2 y d) NO_x. (+) Representan la corrida con el esquema de transporte basado en elementos finitos, y (○) representa la corrida con PPM como el esquema de transporte. Las líneas guía representan las proporciones 2:1, 1:1 y 1:2

ubicadas en la región oriental de la ZMG (TLA, OBL, LDO), mientras que en el resto de las estaciones la correlación mejora notablemente. Para el caso del CO, el mejor desempeño se obtiene para las estaciones AGU y LDO (occidente y oriente, respectivamente), un desempeño pobre en las estaciones del centro y sur de la ZMG (e.g. CEN, TLA y MIR), y un desempeño muy bajo en las estaciones del norte y noreste (ATM y OBL, respectivamente). Respecto a NO_X, la mejor respuesta se obtuvo para las estaciones preferentemente al occidente (VAL y AGU), y la peor nuevamente en la zona norte. Finalmente, la mejor respuesta para el comportamiento del SO_2 se obtuvo en la región del suroeste (AGU), seguida de la región sureste (LDO), y respuestas muy pobres en las demás regiones. La **figura 5** ilustra los hallazgos descritos para el caso de O_3. Se presentan las series de tiempo para los valores observados y simulados de O_3 para tres estaciones particulares: dos con buen desempeño (AGU y VAL, estaciones del lado occidente de la ZMG) y una con desempeño pobre (OBL, estación de la región oriental de la ZMG). Para el caso de las estaciones AGU y VAL se observa que el modelo captura bien la estructura general de la dinámica de O_3 en esa región, con un sobrestimado de concentraciones durante el primer y tercer día de simulación. En particular se nota que las concentraciones decrecen adecuadamente durante las horas de la noche. La reducción de O_3 en horarios nocturnos se lleva a cabo preferentemente por la interacción de O_3 con los NO_X para dar especies nitrogenadas, que al día siguiente, bajo la presencia de luz solar, se descomponen nuevamente en NO_X y O_3. Así, es necesario tener la mezcla correcta de NO_X y O_3 para

CUADRO IV. COEFICIENTES DE CORRELACIÓN (R^2) ENTRE VALORES OBSERVADOS Y SIMULADOS POR ESTACIÓN PARA LOS DOS ESQUEMAS DE TRANSPORTE HORIZONTAL EMPLEADOS

Estación	O_3		CO		NO_X		SO_2	
	MEF	PPM	MEF	PPM	MEF	PPM	MEF	PPM
AGU	0.71	0.73	0.55	0.50	0.43	0.38	0.65	0.65
ATM	0.56	0.61	0.06	0.03	0.03	0.02	0.00	0.01
CEN	0.58	0.50	0.18	0.21	0.32	0.31	–	–
LDO	0.45	0.44	0.48	0.54	0.29	0.31	0.29	0.29
MIR	0.63	0.70	0.21	0.26	0.34	0.38	0.12	0.09
OBL	0.33	0.36	0.02	0.03	0.14	0.13	0.01	0.00
TLA	0.15	0.09	0.33	0.42	0.13	0.16	0.02	0.05
VAL	0.58	0.74	0.32	0.28	0.55	0.39	0.06	0.02

que el modelo responda adecuadamente. Se puede apreciar del **cuadro IV** que efectivamente para estas mismas estaciones (AGU y VAL), el desempeño respecto a los NO_X es bueno. En contraste, para la estación OBL se aprecia en mal desempeño para simular correctamente los NO_X lo que influye en que el modelo pierda capacidad en simular correctamente al O_3. Estos resultados pueden estar siendo influenciados por una distribución espacial deficiente de las emisiones en algunos sectores de la región.

Finalmente, un análisis del comportamiento temporal del estadístico *RCECM* y su segregación en los componentes de error sistemático ($RCECM_s$) y no sistemático ($RCECM_{ns}$), permiten establecer áreas de mejora en la modelación (ver detalles en el Apéndice de este artículo). La **figura 6** muestra dicha información, en la cual se aprecia el error

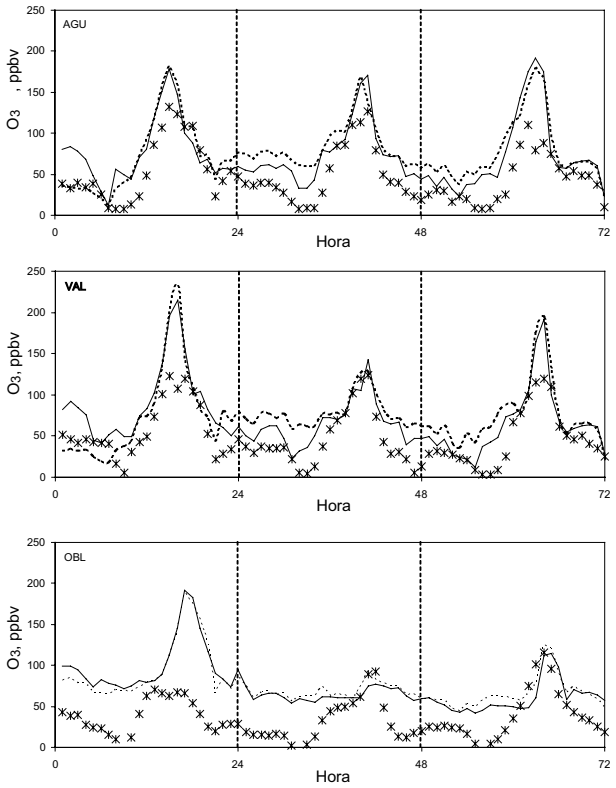

Fig. 5. Series de tiempo para la concentración observada (asteriscos) y simulada de O_3 en tres estaciones de la ZMG. La línea sólida representa la modelación empleando PPM, mientras que la línea punteada representa la modelación empleando el esquema MEF

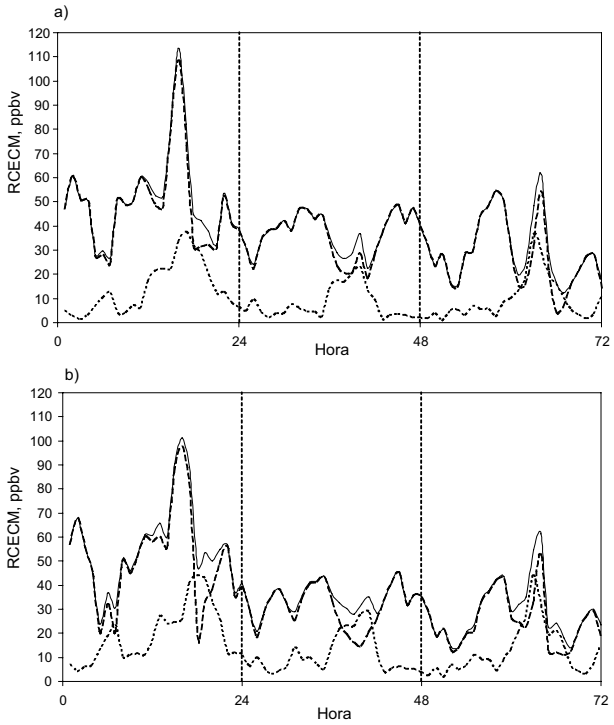

Fig. 6. Series de tiempo para la *RCECM*, y sus componentes sistemático y no sistemático: a) modelación empleando el esquema de transporte MEF; b) modelación empleando el esquema de transporte PPM. Línea sólida: *RCECM* total; línea discontinua: $RCECM_s$; línea punteada: $RCECM_{ns}$

para los dos esquemas de transporte empleados. Se puede notar que la modelación con PPM tiende a tener valores inferiores del *RCECM*. Sin embargo, en ambos casos el componente sistemático del error domina al no sistemático, lo que indica que existen áreas de mejora en la calidad de información alimentada al modelo que pudiera servir para mejorar su desempeño global. Particularmente, se observa que el error no sistemático tiende a ser mayor en los horarios diurnos, lo que indica que en dichos casos el error presente es función de variaciones (ruido) fuera del alcance de la resolución del modelo. Por otro lado, el error presente en horarios nocturnos es primordialmente sistemático.

CONCLUSIONES

Se desarrolló una aplicación de un modelo de calidad del aire tridimensional de segunda generación a la ZMG con el fin de apreciar la capacidad del modelo para seguir adecuadamente la dinámica de contaminantes en la región. En particular, se emplearon dos esquemas numéricos diferentes para tratar el transporte advectivo horizontal. Los resultados indican que, para el caso estudiado, la modelación empleando el esquema PPM es ligeramente superior al MEF. De manera general y para el episodio estudiado, el modelo fue capaz de seguir adecuadamente el comportamiento del ozono, en menor grado el de CO, y tiende a tener un desempeño pobre respecto a SO_2 y NO_X. Un análisis espacial de los datos reveló que el modelo tiende, en general, a capturar adecuadamente la dinámica de los contaminantes en la región oeste, centro y sur de la ZMG, mientras que en la región norte y este se tiende a tener un comportamiento pobre. Asimismo, se aprecia que hay oportunidades de mejora en el comportamiento del modelo durante los períodos nocturnos. Una posible fuente de error que está impactando el desempeño observado es la especificación incorrecta del inventario de emisiones, tal como otros autores han encontrado, lo cual es un tema que deberá ser abordado en trabajos posteriores. Asimismo, será conveniente tener aplicaciones bajo otras condiciones meteorológicas para tener una referencia más clara de la capacidad del modelo para describir adecuadamente la dinámica de la contaminación del aire en la región.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece el apoyo parcial recibido por el Tecnológico de Monterrey para la realización de este trabajo, a través de la Cátedra de Investigación en Calidad del Aire (número de apoyo CAT052).

REFERENCIAS

Carter W.P.L. (1990). A detailed mechanism for the gas-phase atmospheric reactions of organic compounds. Atmos. Environ. 24, 481-518.

Davydova-Belitskaya V., Skiba, Y.N., Bulgakov S. y Martínez A. (1999). Modelación matemática de los niveles de contaminación en la ciudad de Guadalajara, Jalisco, México. Parte I. Microclima y monitoreo de la contaminación. Rev. Int. Contam. Ambient. 15, 103-111.

Davydova-Belitskaya V., Skiba, Y.N., Martínez A. y Bulgakov S. (2001). Modelación matemática de los niveles de contaminación en la ciudad de Guadalajara, Jalisco, México. Parte II. Modelo numérico de transporte de contaminantes y su adjunto. Rev. Int. Contam. Ambient. 17, 97-107.

Doll D.C., Scheffe R.D., Meyer E.L. y Chu S.-H. (1991). Guideline for regulatory application of the Urban Airshed Model. Office of Air Quality, Planning and Standards, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC.

García Meza M.R. (2003). Aplicación preliminar del modelo fotoquímico de calidad del aire CIT para simular la dispersión de contaminantes atmosféricos en la Zona Metropolitana de Guadalajara. Tesis de Licenciatura, Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Occidente, Tlaquepaque, Jalisco, 285 pp.

Gobierno del Estado de Jalisco, Secretaría de Medio Ambiente, Recursos Naturales y Pesca y Secretaría de Salud (1997). Programa para el Mejoramiento de la Calidad del Aire en la Zona Metropolitana de Guadalajara 1997-2001. http://www.ine.gob.mx/publicaciones, consultado: mayo 2007.

Goodin W.R., McRae G.J. y Seinfeld J.H. (1979). A comparison of interpolation methods for sparse data: Application to wind and concentration fields. J. Appl. Meteorol. 18, 761-771.

Goodin W.R., McRae G.J. y Seinfeld J.H. (1980). An objective analysis technique for constructing three-dimensional urban-scale wind fields. J. Appl. Meteorol. 19, 98-108.

Harley R., Russell A.G., McRae G.J., Cass G.R. y Seinfeld J.H. (1993). Photochemical modeling of the Southern California Air Quality Study. Environ. Sci. Technol. 27, 378-388

Harley R.A., Sawyer R.F. y Milford J.B. (1997). Updated photochemical modeling for California's south coast air basin: Comparison of chemical mechanisms and

motor vehicle emissions inventories. Environ. Sci. Technol. 31, 2829-2839.

Hsu Y., Strait R., Roe S. y Holoman D. (2006). SPECIATE 4.0 Speciation database development documentation: Final Report. EPA/600/R-06/161 US Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Research Triangle Park, NC.

INE (2000). *Gestión de la calidad del aire en México: logros y retos para el desarrollo sustentable 1995-2000*. Instituto Nacional de Ecología. Dirección General de Gestión e Información Ambiental, México, D.F. 184 p.

INEGI (2002). XII Censo General de Población y Vivienda 2000. Síntesis de resultados. Jalisco. Instituto Nacional de Estadística Geografía e Informática. http://www.inegi.org.mx/prod_serv/contenidos/espanol/catalogo/Default.asp, consultado: enero 2006.

Khan M. y Russell A.G. (1999). Photochemical reactivities of common solvents: comparison between urban and regional domains. Atmos. Environ. 33, 1085-1092.

McNair L.A., Harley R.A. y Russell A.G. (1996). Spatial inhomogeneity in pollutant concentrations and their implications for air quality model evaluation. Atmos. Environ. 30, 4291-4301.

McRae G.J., Goodin W. y Seinfeld J.H. (1982a). Development of a second-generation mathematical model for urban air pollution – I. Model formulation. Atmos. Environ. 16, 679-696.

McRae G.J., Goodin W.R. y Seinfeld J.H. (1982b). Numerical solution of the atmospheric diffusion equation for chemically reacting flows. J. Comp. Phys. 45, 1-42.

McRae G.J. y Seinfeld J.H. (1983). Development of a second-generation mathematical model for urban air pollution – II. Evaluation of model performance. Atmos. Environ. 17, 501-522.

Mendoza-Domínguez A., Wilkinson J.G., Yang Y.-J. y Russell A.G. (2000). Modeling and direct sensitivity analysis of biogenic emissions impacts on regional ozone formation in the México-U.S. Border Area. J. Air & Waste Manage. Assoc. 50, 21-31.

Mendoza-Domínguez A. y Russell A.G. (2001). Estimation of emission adjustments from the application of four-dimensional data assimilation to photochemical air quality modeling. Atmos. Environ. 35, 2879-2894.

Mendoza A. y Graniel M. (2007). Evaluación exploratoria de la dispersión de contaminantes emitidos por operaciones de quema de gas amargo en la Sonda de Campeche. Rev. Int. Contam. Ambient. 23, 99-113.

NRC (1991). *Rethinking the ozone problem in urban and regional air pollution*. National Research Council. National Academy Press, Washington, D.C. 500 pp.

Odman M.T. (1998). Research on numerical transport algorithms for air quality simulation models. EPA/600/R-97/142 United States Environmental Protection Agency, Office of Research and Development. Washington, D.C. 62 pp.

Ramírez-Sánchez H.U., Andrade-García M.D., González-Castañeda M.E. y Celis-de la Rosa A.J. (2006). Contaminantes atmosféricos y su correlación con infecciones agudas de las vías respiratorias en niños de Guadalajara, Jalisco. Salud Pública México 48, 385-394.

Russell A.G., McCue K.F. y Cass G.R. (1988). Mathematical modeling of the formation and transport of nitrogen-containing pollutants. I: Model evaluation. Environ. Sci. Technol. 22, 263-271.

Russell A. y Odman M.T. (1993). Future directions in photochemical air quality modeling. Water Air Soil Poll. 67, 181-193.

Russell A. y Dennis R. (2000). NARSTO critical review of photochemical models and modeling. Atmos. Environ. 34, 2283-2324.

Srivastava R.K., McRae D.S. y Odman, M.T. (2000). An adaptive grid algorithm for air quality modeling. J. Comp. Phys. 165, 437-472.

Tesche T.W., Georgopoulos P., Seinfeld J.H., Cass G., Lurmann F.L. y Roth P.M. (1990). Improvement of procedures for evaluating photochemical models. Reporte de Radian Corporation para el State of California Air Resources Board, Sacramento, CA.

USEPA (2008). Source Category Code / Temporal Allocation Cross Reference File. Emissions Modeling Clearinghouse - Temporal Allocation, Clearinghouse for Inventories & Emissions Factors, Technology Transfer Network. www.epa.gov/ttn/chief/emch/temporal/index.html, consultado: enero 2009.

Wesely M.L. (1989). Parameterization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models. Atmos. Environ. 23, 1293-1304.

Young T.R. y Boris J.P. (1977). A numerical technique for solving ordinary differential equations associated with chemical kinetics of reactive flow problems. J. Phys. Chem. 81, 2424-2427.

Zuk M., Rojas Bracho L. y Tzintzun Cervantes M.G. (2007). Tercer almanaque de datos y tendencias de la calidad del aire en nueve ciudades mexicanas. Instituto Nacional de Ecología, México, D.F. 116 pp.

APÉNDICE

Sean $C_{e,i}$ y $C_{o,i}$ las concentraciones estimadas y observadas, respectivamente, de una determinada especie química, y donde el subíndice i se refiere a la i-ésima pareja de observación/estimación que se está comparando. Entonces, el error normalizado (*EN*) está dado por:

$$EN = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{\left(C_{e,i} - C_{O,i}\right)}{C_{O,i}}100\% \qquad \text{A.1}$$

donde N es el total de parejas que se están comparando. El sesgo normalizado (*SN*) está dado por:

$$SN = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{\left|C_{e,i} - C_{O,i}\right|}{C_{O,i}}100\% \qquad \text{A.2}$$

El error cuadrado medio normalizado (*ECMN*) se define como:

$$ECMN = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{\left(C_{e,i} - C_{O,i}\right)}{C_{O,i}}\right]^2 100\% \qquad \text{A.3}$$

Asimismo, la raíz cuadrada del error cuadrado medio (*RCECM*) está dada por:

$$RCECM = \left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|C_{e,i} - C_{o,i}\right|^2\right]^{1/2} \qquad \text{A.4}$$

El *RCECM*, al igual que el *EN*, es una buena medida del desempeño global del modelo. Sin embargo, a diferencia del *EN*, el *RCECM* puede indicar si el error en el que el modelo está incurriendo puede ser atribuible al modelo mismo (o a los datos alimentados) o es debido a la existencia de variaciones naturales (ruido) no atribuible al modelo y que no se esperaría el modelo fuera capaz de resolver. Este análisis se logra con el cálculo del *RCECM* sistemático ($RCECM_s$) y no sistemático ($RCECM_{ns}$). Por definición:

$$RCECM^2 = RCECM_s^2 + RCECM_{ns}^2 \qquad \text{A.5}$$

Además,

$$RCECM_s = \left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|\hat{C}_{e,i} - C_{o,i}\right|^2\right]^{1/2} \qquad \text{A.6}$$

donde $\hat{C}_{e,i} = a + bC_{o,i}$, y a y b son coeficientes obtenidos de una regresión lineal. Asmismo,

$$RCECM_{ns} = \left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|C_{e,i} - \hat{C}_{e,i}\right|^2\right]^{1/2} \qquad \text{A.7}$$

Un buen modelo proveerá valores bajos del *RCECM*, explicando la mayoría de las variaciones en las observaciones. Adicionalmente, el $RCECM_s$ debería aproximarse a cero mientras que el $RCECM_{ns}$ debería aproximarse al valor del *RCECM*.

Finalmente, el Índice Diario de Ajuste (*IDA*) se puede tomar como un indicador global de desempeño que agrega de alguna manera todos los demás estadísticos. Los valores del *IDA* varían entre 0 y 1, con un valor de 1 indicando una concordancia completa entre los valores simulados y observados. Se define como:

$$IDA = 1 - \left[\frac{N\left(RCECM\right)^2}{\sum_{i=1}^{N}\left(\left|C_{e,i} - M_o\right| + \left|C_{o,i} - M_o\right|^2\right)}\right] \qquad \text{A.8}$$

donde M_o es la media de las observaciones y está dada por:

$$M_o = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}C_{o,i} \qquad \text{A.9}$$