Explorando la dinámica espacio-temporal de la concentración de monóxido de carbono en la ciudad de Aguascalientes

Héctor Antonio Olmos-Guerrero¹ y Pablo Tenoch Rodríguez-González^{1,2}

 ¹ Maestría en Ciencias en Ingeniería Ambiental, TecNM, Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Av. Adolfo López Mateos Ote. 1801, Bona Gens, Aguascalientes, Aguascalientes, 20256, México, hector.og@aguascalientes.tecnm.mx
 ² Cátedras CONACYT – TecNM campus Aguascalientes, Av. Insurgentes Sur 1582, Ciudad de México, 03940, México, pablo.rg@aguascalientes.tecnm.mx

Resumen

Este estudio evaluó la dinámica espacio-temporal del monóxido de carbono (CO) en la ciudad de Aguascalientes, México, mediante un modelo diferencial basado en un balance de materia, resuelto con técnicas de diferencias finitas. El modelo integró datos de emisiones provenientes de fuentes móviles y fijas reportados en el ProAire 2016, junto con datos meteorológicos de la estación AGSC de la Red Universitaria de Observatorios Atmosféricos (RUOA). Adicionalmente, se utilizó un modelo de red neuronal *feedforward* (FNN) para pronosticar los flujos de emisión de CO de fuentes móviles, empleando variables temporales como hora del día y día de la semana, transformadas en variables continuas mediante funciones seno y coseno. Los resultados de la simulación mostraron que las áreas más afectadas por la contaminación se localizan en el suroeste, sur y oeste de la ciudad, influenciadas principalmente por la dirección y velocidad del viento. El modelo reveló que las fuentes fijas analizadas, correspondientes a cuatro de las 124 reportadas, tienen una contribución limitada a las concentraciones de CO. Por otro lado, el modelo de red neuronal permitió capturar de manera precisa la dinámica temporal de las emisiones vehiculares, destacando la disminución de actividad durante los fines de semana. En conjunto, el modelo espacio-temporal y la red neuronal demostraron ser herramientas efectivas para evaluar la calidad del aire y generar pronósticos detallados de la concentración de CO en áreas urbanas. Los hallazgos pueden apoyar el desarrollo de estrategias de mitigación más precisas, enfocadas en las zonas y factores que contribuyen en mayor medida a la contaminación atmosférica.

Palabras clave- Modelado, simulación, ecuaciones diferenciales, transporte de contaminantes, diferencias finitas.

Abstract

This study evaluated the spatio-temporal dynamics of carbon monoxide (CO) in the city of Aguascalientes, Mexico, using a differential model based on a mass balance, solved with finite difference techniques. The model integrated emission data from mobile and stationary sources reported in the ProAire 2016, along with meteorological data from the AGSC station of the University Network of Atmospheric Observatories (RUOA). Additionally, a feedforward neural network (FNN) model was used to forecast CO emission flows from mobile sources, employing temporal variables such as time of day and day of the week, which were transformed into continuous variables using sine and cosine functions. Simulation results showed that the most affected areas by pollution are located in the southwest, south, and west of the city, primarily influenced by wind direction and speed. The model revealed that the stationary sources analyzed, corresponding to four of the 124 reported, contribute limitedly to CO concentrations. On the other hand, the neural network model effectively captured the temporal dynamics of vchicular emissions, highlighting the decrease in activity during weekends. Together, the spatio-temporal model and the neural network demonstrated to be effective tools for assessing air quality and generating detailed forecasts of CO concentrations in urban areas. The findings could support the development of more precise mitigation strategies, focusing on the areas and factors that contribute the most to atmospheric pollution.

Keywords- Modeling, simulation, differential equations, pollutant transport, finite differences.

I. INTRODUCCIÓN

En un mundo cada vez más urbanizado, la contaminación atmosférica se ha convertido en uno de los principales desafíos ambientales, afectando tanto la salud pública como el equilibrio ecológico. El monóxido de carbono (CO) es un contaminante particularmente relevante, cuya concentración en el aire puede tener efectos perjudiciales sobre la salud humana. La gestión eficaz de la calidad del aire requiere una comprensión detallada de la dinámica de la contaminación y de cómo los contaminantes se distribuyen y transforman en los entornos urbanos.

En este contexto, los modelos matemáticos desempeñan un papel crucial, proporcionando herramientas avanzadas para simular y analizar la dispersión de contaminantes. Por ejemplo, estudios recientes han desarrollado modelos matemáticos para predecir la calidad del aire en áreas urbanas, permitiendo una mejor comprensión de los diferentes fenómenos atmosféricos [1]. De entre los contaminantes analizados, el CO ha sido modelado usando aproximaciones clásicas basadas en primeros principios [2], hasta técnicas de *machine-learning* [3]. Existen múltiples factores que tienen que ser considerados a la hora de desarrollar este tipo de modelos, que van desde las condiciones meteorológicas [4] hasta el comportamiento de la fuentes móviles y fijas [5].

Este trabajo se centra en la simulación de la dinámica espacio-temporal del CO en la ciudad de Aguascalientes, México. Para ello, hemos desarrollado un modelo diferencial basado en un balance de materia [6], resuelto mediante técnicas de diferencias finitas. El modelo incorpora datos críticos del reporte ProAire 2016 [7], que proporciona información detallada sobre las fuentes de emisión en Aguascalientes, así como datos meteorológicos de la Red Universitaria de Observatorios Atmosféricos (RUOA) [8] de la estación AGSC. Esta integración permite evaluar con precisión la influencia de variables clave, como la velocidad y dirección del viento, en la dispersión del CO.

Las simulaciones resultantes tienen el potencial de apoyar el desarrollo de estrategias de mitigación más efectivas, alineadas con la reducción de emisiones y la optimización de procesos ambientales. A través de este proyecto, buscamos no solo avanzar en la comprensión de la dinámica de la contaminación atmosférica, sino también promover prácticas más sostenibles y eficaces para mejorar la calidad del aire en entornos urbanos.

II. METODOLOGÍA

A. Modelo espacio-temporal de CO

El modelo propuesto se basa en un balance de materia (1) dentro de un elemento diferencial de volumen (Fig. 1). Este balance incluye los términos de reacción y sedimentación, los cuales son relevantes en el análisis de compuestos reactivos como el ozono (O₃) o partículas suspendidas, respectivamente. Sin embargo, en el presente estudio, los términos de reacción y sedimentación han sido omitidos debido a la naturaleza de los compuestos considerados.

$$\begin{bmatrix} densidad de flujo \\ cantidad de materia de \\ entrada \\ + [emisión] - [sedimentación] \\ = \begin{bmatrix} Acumulación de \\ Materia dentro del sistema \end{bmatrix} + [reacción]$$
(1)

La densidad de flujo de cantidad de materia (2) está definida por la suma del transporte convectivo y difusivo (Ley de Fick) [1].

$$\boldsymbol{N}_{\alpha} = \boldsymbol{J}_{\alpha} + \boldsymbol{c}_{\alpha}\boldsymbol{\nu} \tag{2}$$

Donde **N** es el vector de densidad de flujo masico combinado, **J** es la densidad de flujo masico difusivo, *c* es la concentración de la especie α y ν es el vector de velocidad media másica.



Fig. 1. Ilustración del balance de materia dentro del elemento diferencial.

Para el diseño del modelo, se adoptaron las siguientes consideraciones: ausencia de reacciones químicas, no sedimentación (dado que se trata de un gas), y se asumió que el transporte difusivo es despreciable en comparación con el transporte convectivo. El transporte de materia se limita a las coordenadas x y z (en la superficie), con una altura de mezcla

constante (h). Las dimensiones de la ciudad (límites) se definen como WLh. El balance final se expresa como (3).

$$[N_{A}|_{x}\Delta zh + N_{A}|_{z}\Delta xh] - [N_{A}|_{x+\Delta x}\Delta zh + N_{A}|_{z+\Delta z}\Delta xh] + [\dot{q}\Delta x\Delta z] = \left[\frac{\Delta m}{\Delta t}\right]$$
(3)

Después de aplicar la definición del límite se llega a la expresión definida como (4).

$$\frac{\partial N_{Ax}}{\partial x} - \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} + \frac{\dot{q}}{h} = \frac{\partial c_A}{\partial t}$$
(4)

A continuación, se sustituyen las definiciones de densidad de flujo de cantidad de materia (5) y (6) en (4). Es importante señalar que el término difusivo se omite posteriormente, ya que, en sistemas abiertos, la magnitud del transporte convectivo suele ser mucho mayor que la del transporte difusivo.

$$N_{Ax} = -\mathcal{D}_{AB} \frac{dc_A}{dx} + c_A v_x \tag{5}$$

$$N_{Az} = -\mathcal{D}_{AB} \frac{dc_A}{dz} + c_A v_z \tag{6}$$

El modelo final, se muestra en (7).

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + v_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} + c_A \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial z}\right) = \frac{\dot{q}}{h}$$
(7)

B. Discretización del modelo

El modelo es resulto aplicando la técnica de diferencias finitas. Se utilizaron diferencias finitas centradas (8) para las variables espaciales y diferencias finitas hacia adelante (9) para el tiempo.

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y(x + \Delta x) - y(x - \Delta x)}{2\Delta x}$$
(8)

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y(t + \Delta t) - y(t)}{\Delta t}$$
(9)

Como notación se utilizaron los índices *i*, *j* y *k* para referirse a *x*, *z* y *t*, además que se asume que $\Delta x = \Delta z = \Delta h$. El modelo de forma discretizada se muestra como (10).

$$c_{A_{i,j}^{k+1}} = c_{A_{i,j}^{k}} + \Delta t \left[-v_{x_{i,j}^{k}} \frac{c_{A_{i+h,j}^{k}} - c_{A_{i-h,j}^{k}}}{2\Delta h} - v_{z_{i,j}^{k}} \frac{c_{A_{i,j+h}^{k}} - c_{A_{i,j-h}^{k}}}{2\Delta h} - c_{A_{i,j}^{k}} \left[\frac{v_{x_{i+h,j}^{k}} - v_{x_{i-h,j}^{k}}}{2\Delta h} + \frac{v_{z_{i,j+h}^{k}} - v_{z_{i,j-h}^{k}}}{2\Delta h} \right] + \frac{\dot{q}}{h} \right]$$
(10)

Las fronteras del sistema se definen como semi "abiertas", en las que puede salir la materia, pero no entrar otra vez al sistema. Para un sistema $n \times n$ si la materia sale por la parte superior $(j = n \forall i \neq \{0, n\})$ la frontera se define como (11), por la parte inferior $(j = 0 \forall i \neq \{0, n\})$ la frontera se define como (12), por la izquierda $(i = 0 \forall j \neq \{0, n\})$ la frontera se define como (13) y por la derecha $(i = n \forall j \neq \{0, n\})$ la frontera se define como (14).

$$c_{A_{i,j}^{k+1}} = c_{A_{i,j}^{k}} + \Delta t \left[-v_{x_{i,j}^{k}}^{k} \frac{c_{A_{i+1,j}^{k}} - c_{A_{i-1,j}^{k}}}{2\Delta h} - v_{z_{i-1,j}^{k}}^{k} \frac{c_{A_{i,j}^{k}} - c_{A_{i,j-2}^{k}}}{2\Delta h} - c_{A_{i,j}^{k}}^{k} \left[\frac{v_{x_{i+1,j}^{k}} - v_{x_{i-1,j}^{k}}}{2\Delta h} + \frac{v_{z_{i,j}^{k}} - v_{z_{i,j-2}^{k}}}{2\Delta h} \right] + \frac{\dot{q}}{h} \right]$$
(11)

$$c_{A_{i,j}}^{k+1} = c_{A_{i,j}}^{k} + \Delta t \left[-v_{x_{i,j}}^{k} \frac{c_{A_{i+1,j}}^{k} - c_{A_{i-1,j}}^{k}}{2\Delta h} - v_{z_{i+1,j}}^{k} - v_{z_{i+1,j}}^{k} \frac{c_{A_{i,j+2}}^{k} - c_{A_{i,j}}^{k}}{2\Delta h} \right] - c_{x_{i,j}}^{k} \left[\frac{v_{x_{i+1,j}}^{k} - v_{x_{i-1,j}}^{k}}{2\Delta h} + \frac{v_{z_{i,j+2}}^{k} - v_{z_{i,j}}^{k}}{2\Delta h} \right] + \frac{d}{2} \right]$$
(12)

$$c_{A_{i,j}^{k+1}} = c_{A_{i,j}^{k}} + \Delta t \left[-v_{x_{i+1,j}^{k}} \frac{c_{A_{i+2,j}^{k}} - c_{A_{i,j}^{k}}}{2\Delta h} - v_{z_{i,j}^{k}} \frac{c_{A_{i,j+1}^{k}} - c_{A_{i,j-1}^{k}}}{2\Delta h} \right] + \frac{1}{h}$$

$$\left[v_{x_{i+1,j}^{k}} - v_{x_{i,j}^{k}} - v_{x_{i,j}^{k}} - v_{x_{i,j}^{k}} - v_{x_{i,j-1}^{k}} - v_{x_{i,j-1}^{k}} \right]$$

$$\left[v_{x_{i+1,j}^{k}} - v_{x_{i,j}^{k}} - v_{x_{i,j}^{k}} - v_{x_{i,j-1}^{k}} - v_{x_{i,j-1}^{k}} - v_{x_{i,j-1}^{k}} - v_{x_{i,j-1}^{k}} \right]$$

$$\left[v_{x_{i+1,j}^{k}} - v_{x_{i,j}^{k}} - v_{x_{i,j}^{k}} - v_{x_{i,j-1}^{k}} - v_{x_{i,j-1$$

$$-c_{A_{i,j}^{k}}\left[\frac{v_{xi+2,j}-v_{xi,j}}{2\Delta h}+\frac{v_{zi,j+1}-v_{zi,j-1}}{2\Delta h}\right]+\frac{q}{h}$$

$$c_{A_{i,j}^{k+1}}=c_{A_{i,j}^{k}}+\Delta t\left[-v_{x_{i-1,j}^{k}}\frac{c_{A_{i,j}^{k}}-c_{A_{i-2,j}^{k}}}{2\Delta h}-v_{z_{i,j}^{k}}\frac{c_{A_{i,j+1}^{k}}-c_{A_{i,j-1}^{k}}}{2\Delta h}\right]$$

$$-c_{A_{i,j}}^{k} \left[\frac{v_{x_{i,j}}^{k} - v_{x_{i-2,j}}^{k}}{2\Delta h} + \frac{v_{z_{i,j+1}}^{k} - v_{z_{i,j-1}}^{k}}{2\Delta h} \right] + \frac{\dot{q}}{h} \right]$$
(14)

Mientras que para las entradas las fronteras son análogas a las salidas, pero las concentraciones en los puntos que caen fuera del sistema $n \times n$ se definen como cero.

C. Parámetros del modelo

Para realizar las simulaciones, el parámetro de flujo de emisiones (\dot{q}) fue estimado a partir de la información reportada por ProAire, un instrumento de gestión que establece acciones para prevenir y revertir el deterioro de la calidad del aire. Según el reporte, en 2016 se emitieron 222.73 toneladas de CO por fuentes fijas (correspondientes a 124 sectores industriales) y 128,732.16 toneladas de CO por fuentes móviles. Además, se indicó que el 74.49% del padrón vehicular de la ciudad corresponde a Aguascalientes.

En cuanto a los datos sobre la velocidad y dirección del viento, se utilizaron las bases de datos meteorológicas de la Red Universitaria de Observatorios Atmosféricos (RUOA), específicamente de la estación AGSC. Los datos de velocidad y dirección del viento fueron descompuestos en sus componentes en x y y para poder ser utilizadas en el modelo. La simulación del sistema se realizó empleando los datos de velocidad y dirección del viento correspondientes al día 01/06/2024.

D. Flujo de emisión por fuentes móviles

Para estimar la dinámica del flujo de emisiones por fuentes móviles se planteó la determinación de una relación entre la información presentada en el reporte ProAire sobre el flujo de emisiones anuales por fuentes móviles y el tránsito diario promedio anual reportado en el programa de Consolidación del Circuito de Flujo Continuo de la Av. Aguascalientes [9]. La relación se definió como el flujo vehicular por semana y el flujo de emisiones por fuentes móviles por semana. El flujo de emisiones por fuentes móviles por semana se evaluó aplicando un factor de conversión de años a semanas al dato presentado por el programa ProAire, mientras que el flujo vehicular durante la semana se evaluó a partir de (15), que es la integración del flujo vehicular en el periodo de tiempo T, que para el análisis fue de una semana.

$$v_e = \int_0^T \dot{q}_v dt \approx \sum_{i=1}^N \dot{q}_{vi} \Delta t \tag{15}$$

Donde v_e define la cantidad de vehículos que circularon en ese cruce en el periodo de una semana, T es el horizonte de tiempo (una semana para el análisis), \dot{q}_v es la función que describe la dinámica del flujo vehicular en el cruce. En el reporte la información sobre el flujo vehicular se muestra como datos discretos en periodos de tiempo de una hora (N datos discretos), por lo que la integral fue aproximada a una sumatoria para poder llevar a cabo la evaluación del parámetro para determinar la relación.

E. Modelo de red neuronal

Las de redes neuronales artificiales (RNA) son un tipo de modelos muy populares por su capacidad para poder representar sistemas altamente no lineales [10]. En este análisis, se empleó un modelo de red neuronal *feedforward* (FNN) para pronosticar el parámetro de flujo de emisiones que se encuentra en modelo de la dinámica espacio-temporal de CO. El modelo de red neuronal fue entrenado con los datos los obtenidos a partir de la relación para evaluar el flujo de emisiones por fuentes móviles, en total 168 datos. Los parámetros de entrada al modelo fueron variables temporales, hora del día { $t \in \mathbb{Z}$, $0 \le x \le 23$ } y día de la semana { $t \in \mathbb{Z}$, $0 \le x \le 6$ }. Estas variables son discretas, así que se les aplicaron las funciones (16) y (17) para pasar de variables discretas a continuas.

$$t_{sin} = \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right) \tag{16}$$

$$t_{cos} = \cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right) \tag{17}$$

Donde aquí t_{sin} y t_{cos} es la transformación de la variable temporal t (hora del día o día de la semana) discreta a continua. En este contexto T representa el periodo de la variable temporal. Hay que señalar que esta transformación aumenta el número de los parámetros de entrada al modelo de solo dos (hora del día y día de la semana) a cuatro (seno y coseno de la hora del día y seno y coseno del día de la semana).

Para este estudio, se procedió a emplear un modelo de red neuronal tipo perceptrón. La forma general de este modelo se presenta en (18)

$$a_j^{(l)} = \sigma \left(\boldsymbol{W}_j^{(l)} \cdot \boldsymbol{a}^{(l-1)} + \boldsymbol{b}_j^{(l)} \right)$$
(18)

Donde $\boldsymbol{W}^{(l)}$ y $\boldsymbol{b}^{(l)}$ son los pesos y umbrales de la capa $l, \sigma(\cdot)$ es la función de activación, $\boldsymbol{a}^{(l-1)}$ son las activaciones (salidas) de la capa anterior (l-1) y $\boldsymbol{a}^{(l)}$ es la salida de la neurona j.

Los hiperparámetros empleados para entrenamiento del modelo fueron: una topología 4-300-300-1, seleccionada de manera empírica, para prevenir el sobre entrenamiento del modelo; la función de pérdida seleccionada fue el Error Cuadrático Medio, MSE por sus siglas en inglés (19); el optimizador fue Adam, la tasa de aprendizaje se utilizó de 0.1; el número de épocas para el entrenamiento fue de 100; se utilizó un tamaño de *batches* de 30 y como función de activación *leaky relu* en las capas internas y lineal a la salida. La base de datos fue separada en un 90% para la fase de entrenamiento y 10% para validación del modelo.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (a_i - y_i)^2$$
(19)

Donde MSE es el Error Cuadrático Medio, N es el número de datos usados para el entrenamiento, a_i es la salida del modelo de red neuronal (última capa) evaluada con el conjunto de datos i y y_i es el dato experimental real que se busca ajustar en el modelo.

El modelo de red neuronal fue diseñado utilizando las librerías de *Keras* [11] en el lenguaje de programación de alto nivel, Python.

F. Algoritmo de solución del modelo

El modelo discretizado junto con sus fronteras se resolvió utilizando el método explicito [12]. Los parámetros que se definieron para la simulación fueron, el número de nodos como 10×10 ; la distancia entre nodo a nodo fue de $\Delta h = 1000 m$; la altura de la mezcla se manejó como constante y se utilizó un valor de h = 1500m; los incrementos en el tiempo fueron de $\Delta t = 1/60 h$ y se manejó una concentración inicial para toda la superficie de $C_o = 0.1 \,\mu g/m^3$. Además, se cargó el *dataframe* con la base de datos de velocidad y dirección del viento de la RUOA para evaluar las componentes de la velocidad en cada incremento en el tiempo.

Para la simulación se seleccionaron cuatro puntos que definen algunas fuentes fijas en la ciudad y ocho puntos altamente transitados en la ciudad que definen las fuentes móviles. El flujo de emisión (\dot{q}) para las fuentes fijas fue de 266869.61 $\mu g/m^2 \cdot h$ mientras que, para las fuentes móviles, el modelo de red neuronal fue evaluó constantemente a partir de los cambios en el tiempo.

El modelo comienza la simulación desde un valor inicial de t = 0 h y termina la simulación al llegar a t = 24 h (un día de simulación). El algoritmo general de solución se muestra en la Figura 2. El algoritmo de solución fue programado como un *script* en Python. Por último, para definir la escala máxima de medición se tomó como referencia el valor límite de concentración de 10000 $\mu g/m^3$ (por 8 horas), la cual se puede encontrar en la NOM-021-SSA1-2021 [13].

Se emplearon herramientas de Sistemas de Información Geográfica (SIG) que vienen en la librería de *Matplotlib* [14] en Python, para visualizar el comportamiento de la dinámica de la concentración de CO sobre la ciudad de Aguascalientes e identificar zonas más afectadas a lo largo de los días. Por último, para la validación del modelo los resultados de los promedios horarios de las simulaciones se compararon con los registros de las estaciones de monitoreo que existen en la ciudad de Aguascalientes. Las bases de datos se pueden encontrar en el Sistema Nacional de Información de la Calidad del Aire (SINAICA) [15].

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La aplicación de la relación entre el flujo de emisiones semanal y el flujo vehicular semanal al conjunto de datos discretos presentados en el programa de Consolidación del Circuito de Flujo Continuo de la Av. Aguascalientes dieron como resultado la estimación de los perfiles de la dinámica del flujo de emisiones de CO en el estado de Aguascalientes, que se puede apreciar en la Fig.2. Se puede observar que la dinámica de las emisiones muestra diferencias notables en los días sábado y domingo, con respecto a los otros días, lo que tiene sentido, ya que la mayor carga de actividades ocurre a lo largo de la semana, dejando los fines de semana como los días donde la actividad humana es más baja.



Fig. 2. Estimación del perfil de emisiones de CO promedio en el estado de Aguascalientes a lo largo de una semana.

Con la información obtenida de la estimación del perfil de emisiones de CO promedio a lo largo de la semana se entrenó el modelo de red neuronal, utilizando como parámetros de entrada las variables temporales (hora del día y día del año) en su versión de variables continuas. La transformación de las variables temporales se muestra en las Fig. 3 y 4



Fig. 3. Conversión de la variable hora del día en el seno y coseno de la hora del día.



Fig. 4. Conversión de la variable día de la semana en el seno y coseno del día de la semana

Los resultados del entrenamiento del modelo de red neuronal se muestran en las Fig. 5 y 6. La Fig. 5 muestra el comportamiento de la función pérdida durante el entrenamiento del modelo, se observa que el modelo comienza a estabilizarse aproximadamente después de las 50 épocas, donde el valor del MSE casi no se modifica, tanto para el conjunto de datos de entrenamiento como para el conjunto de validación. Por otro lado, la Fig. 6 muestra los resultados del entrenamiento del modelo, al comparar la respuesta de este comparado con los datos empleados para el entrenamiento y para la validación; se puede observar que el modelo sigue muy de cerca el comportamiento dinámico del flujo de emisiones de CO a lo largo de la semana, por lo que se puede afirmar que el modelo es capaz de identificar los cambios en los flujos de emisión en función de la coordenada temporal que se esté analizando.

La simulación del modelo espacio-temporal de CO durante el horizonte temporal mostró la estimación de la dinámica de la concentración de CO sobre la ciudad de Aguascalientes. En la Fig. 7, se muestra la gráfica de contorno (usando SIG) del instante de tiempo cuando se detectó el nivel máximo de concentración de CO (5665.57 $\mu g/m^3$) a lo largo del día simulado. La Fig. 7 muestra los puntos seleccionados para simular las fuentes fijas y móviles, además de la posición de la estación de monitoreo de la RUOA: AGSC y las cuatro estaciones de monitoreo que se encuentran alrededor de la ciudad, que son la del CBTIS (CBT), Instituto Educativa (IED), Centro (CEN) y secretaria del Medio Ambiente (SMA). De la simulación se puede apreciar que en ese día en particular (01-06-2022), las zonas más afectadas en la ciudad por CO fueron la zona sur y suroeste de la ciudad. Hay que señalar que este comportamiento es altamente dependiente de la velocidad y dirección del viento en la región, por lo que se pueden obtener resultados diferentes en función del día que se esté analizando.



Fig. 5. Función de pérdida durante el entrenamiento del modelo de red neuronal.



Fig. 6. Evaluación del modelo de red neuronal y estimaciones del flujo de emisiones de CO por hora a lo largo de una semana.



Fig. 7. Concentración de CO estimada por el modelo espacio-temporal para el día 01/06/2024 a las 9.42 horas.

Para validar el modelo se procedió a comparar los resultados del modelo con los reportados por las estaciones de monitoreo que se encuentran ubicadas en diferentes puntos de la ciudad de Aguascalientes. En particular para el día que se consideró para generar la simulación, la única estación de monitoreo que contaba con información fue la de la SMA. Los resultados de la comparación se muestran en la Fig. 8. Los resultados de la comparación mostraron que el modelo espacio-temporal de CO sigue de cerca el comportamiento de la dinámica de CO pero presenta un problema de desfase temporal en la estimación del pico máximo de concentración con respecto a los valores reportados por la estación de monitoreo de alrededor de dos horas. El valor máximo registrado por la estación de monitoreo SMA durante ese día fue de 2611.11 $\mu g/m^3$, mientras que el modelo estimo un valor de máximo de 2957.69 $\mu g/m^3$ sobreestimando ligeramente el valor real. Por otro lado, el valor promedio de la concentración a lo largo del día evaluada por los registros de la estación SMA fue de 607.40 $\mu g/m^3$ mientras que la obtenida por el modelo fue de 654.39 $\mu g/m^3$, un poco por arriba de la evaluada con los datos de la estación.



Fig. 8. Concentración promedios horaria sobre la SMA obtenida por el modelo espacio-temporal y su comparación con la reportada por la estación de monitoreo de SMA.

IV. CONCLUSIÓN

El modelo espacio-temporal desarrollado para evaluar la dinámica del CO en la ciudad de Aguascalientes demostró ser una herramienta efectiva para simular y analizar su dispersión en el entorno urbano. Los resultados de la simulación mostraron que las áreas más afectadas por la contaminación se encuentran en el suroeste, sur y oeste de la ciudad, con concentraciones máximas estimadas de hasta 5665.57 $\mu g/m^3$, valores que se encuentran ligeramente arriba del valor medio del límite normativo de 10000 $\mu g/m^3$ establecido por la NOM-021-SSA1-2021 para exposiciones de ocho horas. Estas concentraciones están fuertemente influenciadas por la dirección y velocidad del viento, las cuales varían de forma significativa durante el día y condicionan la distribución de las emisiones.

La integración del modelo diferencial con una red neuronal para pronosticar flujos de emisión vehiculares representó un avance metodológico significativo. La red neuronal, entrenada con 168 datos temporales, logró capturar la dinámica no lineal de las emisiones con un MSE de 0.015, lo que demuestra su capacidad para ajustar con precisión los patrones de emisión en función de la hora del día y el día de la semana.

En cuanto a las fuentes fijas, aunque el modelo incluyó únicamente cuatro de las 124 reportadas en el ProAire 2016, los resultados indicaron que su contribución a las concentraciones de CO es limitada. Esto resalta la necesidad de ampliar el análisis para incluir un mayor número de fuentes fijas y evaluar su impacto de manera más integral.

La validación del modelo mostró un seguimiento de la dinámica del CO con respecto a los datos reales, aunque presenta un desfase temporal de aproximadamente dos horas en el pico máximo de concentración. El valor máximo registrado por la estación SMA fue de 2611.11 $\mu g/m^3$, mientras que el modelo estimó 2957.69 $\mu g/m^3$, ligeramente superior, de alrededor del 8%. En cuanto al valor promedio, la estación SMA reportó 607.40 $\mu g/m^3$, mientras que el modelo obtuvo 654.39 $\mu g/m^3$, un poco más alto, aproximadamente un 13%. En ambos casos el modelo generó una sobrestimación. A partir de estos resultados se puede considerar que el modelo tiene un desempeño sólido en cuanto a la predicción del promedio diario, pero puede requerir algunos ajustes para mejorar la precisión en la predicción de los picos máximos de concentración.

En resumen, el modelo desarrollado no solo proporciona información detallada sobre la dispersión del CO en Aguascalientes, sino que también sirve como una herramienta valiosa para el diseño de políticas públicas orientadas a mitigar la contaminación del aire. Al destacar las áreas más vulnerables y los factores clave que afectan la calidad del aire, este trabajo contribuye al desarrollo de estrategias de mitigación más precisas y adaptadas a las características locales.

REFERENCIAS

- Sevryukova, E. A., Solodkov, A., Gorelik, A., Bespalova, D., & Volkova, E. (2021, January). Mathematical Model for Air Quality Pprediction in the Urban Area. In 2021 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (ElConRus) (pp. 2879-2883). IEEE. https://doi.org/10.1109/ElConRus51938.2021.9396451
- [2] Pantusheva, M., Mitkov, R., Hristov, P. O., & Petrova-Antonova, D. (2022). Air pollution dispersion modelling in urban environment using CFD: a systematic review. Atmosphere, 13(10), 1640. https://doi.org/10.3390/atmos13101640
- [3] Almubaidin, M. A., binti Ismail, N. S., Latif, S. D., Ahmed, A. N., Dullah, H., El-Shafie, A., & Sonne, C. (2024). Machine learning predictions for carbon monoxide levels in urban environments. Results in Engineering, 22, 102114. https://doi.org/10.1016/j.rineng.2024.102114
- [4] Tan, Z., Wang, J., Yu, Z., & Luo, Y. (2023). Spatiotemporal Analysis of XCO2 and Its Relationship to Urban and Green Areas of China's Major Southern Cities from Remote Sensing and WRF-Chem Modeling Data from 2010 to 2019. Geographies, 3(2), 246-267. https://doi.org/10.3390/geographies3020013
- [5] Kwiecień, J., & Szopińska, K. (2020). Mapping carbon monoxide pollution of residential areas in a Polish city. Remote Sensing, 12(18), 2885. https://doi.org/10.3390/rs12182885
- [6] Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2020). Fenómenos de transporte. Reverté.
- [7] Gobierno del Estado de Aguascalientes, "Programa Cielo Claro para la Mejora en la Calidad del Aire del Estado de Aguascalientes," Aguascalientes, México, 1^a ed., 29-nov-2018. [En línea]. Disponible: https://www.aguascalientes.gob.mx/ssmaa/pdf/Programa_Cielo_Claro_(

ProAire)_Aguascalientes_2018-2028_1era_Edici%C3%B3n_29-nov-18.pdf [Accesado: 7-Oct-2024].

- [8] Red Universitaria de Observatorios Atmosféricos, "Inicio," [En línea]. Available: https://www.ruoa.unam.mx/. [Accesado: 7-Oct-2024].
- [9] Gobierno del Estado de Aguascalientes, "Consolidación del circuito de flujo continuo de la Av. Aguascalientes" Aguascalientes, México, febrero 2021. [En línea]. Dispobible: https://eservicios2.aguascalientes.gob.mx/servicios/sicaf2/Uploads/3125 53acbgazaav.ags_blvdzacatecas.pdf. [Accessed: 07-Oct-2024].
- [10] Nehra, N., Sangwan, P., & Kumar, D. (2021). Artificial neural networks: a comprehensive review. Handbook of machine learning for computational optimization, 203-227.
- [11] Chollet, F., & others. (2015). Keras. GitHub. Retrieved from https://github.com/fchollet/keras
- [12] Chapra, S. C., Canale, R. P., Ruiz, R. S. G., Mercado, V. H. I., Díaz, E. M., & Benites, G. E. (2011). Métodos numéricos para ingenieros (Vol. 5, pp. 859-947). New York, NY, USA: McGraw-Hill.
- [13] Norma Oficial Mexicana NOM-021-SSA1-2021, "Salud ambiental. Criterio para evaluar la calidad del aire ambiente, con respecto al monóxido de carbono (CO). Valores normados para la concentración de monóxido de carbono (CO) en el aire ambiente, como medida de protección a la salud de la población." Diario Oficial de la Federación, México, 29 de octubre de 2021. [En línea]. Disponible: https://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5634084&fecha=29/1 0/2021#gsc.tab=0 [Accesado: 07-Oct-2024].
- [14] Hunter, J. D. (2007). Matplotlib: A 2D graphics environment. Computing in Science & amp; Engineering, 9(3), 90–95.
- [15] Sistema Nacional de Información de la Calidad del Aire (SINAICA), "Inicio," [En línea]. Disponible: https://sinaica.inecc.gob.mx/. [Accesado: 7-Oct-2024].