

Un método estadístico para la estimación de la altura de la capa de mezcla.

Dr J. Andrés Christen
Instituto de Matemáticas
Unidad Morelia
UNAM
Nicolás Romero 150, Centro
58000 Morelia, MICH
MÉXICO

Dr Alejandro Salcido
Instituto de Inves. Eléctricas
Div. Fuentes de Energía
Depto. Sistemas de Combustión
Apartador postal 475
62001 Cuernavaca, MOR
MÉXICO

Resumen

Uno de los parámetros requeridos por los modelos dispersión y transporte de contaminantes es la *altura de la capa de mezcla*. Durante las horas de sol (situaciones convectivas), es posible distinguir tres capas traslapadas en la capa más baja de la atmósfera: La *capa superficial*, la *capa de mezcla* y la *capa de "entrainment"*. Esta última es una capa atmosférica delgada que se caracteriza por una inversión en la temperatura que suprime la turbulencia en la *atmósfera libre superior*. Comúnmente las variables meteorológicas sufren una discontinuidad en la capa de entrainment. Aquí, este último hecho es usado para proponer un modelo de punto de cambio para el ajuste de observaciones derivadas de sondeos atmosféricos. A su vez, la variabilidad estocástica de las observaciones es considerada de tal suerte que se considera un modelo estadístico de punto de cambio para estimar la altura de la capa de mezcla, siendo el punto de cambio dicha altura. En este trabajo proponemos también las distribuciones *a priori* para los parámetros en nuestro modelo y las técnicas necesarias para calcular las distribuciones posteriores de interés. A su vez, se estudia un ejemplo con datos obtenidos en Texcoco, México.

A Statistical method for estimating the convective mixing height.

Dr J. Andrés Christen
Instituto de Matemáticas
Unidad Morelia
UNAM
Nicolás Romero 150, Centro
58000 Morelia, MICH
MÉXICO

Dr Alejandro Salcido
Instituto de Inves. Eléctricas
Div. Fuentes de Energía
Depto. Sistemas de Combustión
Apartador postal 475
62001 Cuernavaca, MOR
MÉXICO

Abstract

An important parameter often required by air quality models is the so called *mixing height*. In day time hours (convective situations), three overlapped layers may be distinguished in the lowest part of the atmosphere: the *superficial layer*, the *mixed layer* and the *entrainment layer*. The latter is a thin atmospheric layer that reverses temperature and buffers the upper *free atmosphere*. Commonly, atmospheric variables are discontinuous at the entrainment layer. In this approach this latter fact is used to develop a change point analysis for atmospheric measurements. Then, the change point considered in the statistical model is precisely the mixing height. We also discuss the *a priori* distributions for the parameters in our model and the techniques needed to perform the necessary calculations. Some examples are analysed using data obtained in Texcoco, México.

1 Introducción

En estudios de modelado de la calidad del aire algunas técnicas matemáticas son necesarias para pre-procesar la información meteorológica disponible y prepararla como datos correctos de entrada para modelos de dispersión usados para simular fenómenos de dispersión y transporte de contaminantes en el aire. Uno de estos parámetros meteorológicos requeridos por los modelos de dispersión es la así llamada *altura de la capa de mezcla*. Aun cuando en la literatura no hay una definición unificada de la altura de la capa de mezcla, normalmente se la hace coincidir con el tope de la zona de entrainment o con el tope de la capa de mezcla. Estas dos definiciones son equivalentes en el modelo “slab” de la capa límite planetaria convectiva, donde el ancho de la capa de “entrainment” se asume como infinitesimal. Desde este punto de vista, el comportamiento de la temperatura potencial virtual a diferentes alturas de la atmósfera toma una forma muy simple que puede ser usada para definir un modelo operacional para estimar la altura de la capa de mezcla a partir de sondeos atmosféricos. Este es el problema que nos ocupa.

Los fenómenos de transporte y dispersión de contaminates atmosféricos ocurren principalmente dentro de la capa límite planetaria, (“Planetary Boundary Layer”), o PBL. Esta es la capa más baja de la atmósfera la cual intercambia intensamente masa, momento y energía con la superficie terrestre. Prácticamente toda la turbulencia atmosférica, que es el principal mecanismo de transporte y dispersión de contaminantes en el aire, es creada dentro de la PBL y permanece confinada ahí. Durante las horas de sol (situaciones convectivas), es posible distinguir tres capas translapadas en la PBL: La *capa superficial*, que es la capa atmosférica más cercana a la superficie. La *capa de mezcla*, que es la capa central de la PBL donde se lleva a cabo una intensa mezcla turbulenta convectiva y donde, como consecuencia, los parámetros meteorológicos como velocidad del viento, dirección del viento y temperatura potencial son casi constantes con la altura. Y la *capa de “entrainment”*, que es una capa atmosférica delgada de gran estratificación localizada en el tope de la capa de mezcla, que se caracteriza por una inversión en la temperatura que suprime la turbulencia en la *atmósfera libre* superior. Comúnmente las variables meteorológicas sufren una discontinuidad en la capa de entrainment. Esta estructura estratificada para la PBL resulta evidente al inspeccionar una gráfica de la temperatura potencial virtual a varias alturas, derivada de un sondeo atmosférico; vea la Figura 1.

Una vez que las condiciones convectivas están completamente establecidas, el comportamiento vertical de la temperatura potencial virtual toma una forma sencilla que hacen evidentes las capas atmosféricas mencionadas arriba. La temperatura potencial virtual empieza decreciendo para los primeros cien metros (en la capa superficial), se mantiene casi constante en el primer o segundo kilómetro (en la capa de mezcla), después se incrementa bruscamente en unos cientos de metros (en la capa de entrainment), y finalmente, crece constantemente (en la atmósfera libre).

Estas observaciones sugieren un modelo muy simple para describir la dependencia de la temperatura potencial virtual con respecto a la altura; este modelo ha sido bosquejado en la Figura 1 con líneas sólidas. Primero, las variaciones dentro de las (delgadas) capas superficiales y de entrainment son ignoradas. Tenemos entonces que la temperatura potencial virtual θ_i a la altura z_i permanece igual a cierta constante T_1 ; para z_i menor que cierta altura h , que sería la altura de la capa de mezcla (esto representaría el comportamiento de θ_i dentro de la capa de mezcla). Y para la temperatura potencial virtual θ_i a la altura z_i mayor que h (en la atmósfera libre) $\theta_i = T_0 + \gamma(z_i - h)$; para una temperatura inicial $T_0 > T_1$ y un gradiente $\gamma > 0$.

El modelo expuesto arriba representa una tendencia central que ignora variaciones locales de la temperatura potencial virtual. En este caso, dichas variaciones locales serán explicadas con una variación estocástica introduciendo el uso de un modelo estadístico, como veremos en el siguiente punto.

2 Planteamiento estadístico

Dado el modelo básico explicado arriba, no es difícil establecer un modelo estadístico para este problema. Indudablemente que estamos ante un problema de inferencia estadística donde se tienen una serie de observaciones (la temperatura potencial virtual a diferentes alturas) y de éstas se desea inferir la altura de la capa de mezcla. Podemos establecer el modelo estadístico de la siguiente manera (usando la notación de arriba):

$$\begin{aligned} \theta_i &= T_1 + e_i && \text{si } z_i \leq h, \\ \theta_i &= T_0 + \gamma(z_i - h) + e_i && \text{si } z_i > h. \end{aligned}$$

Donde las e_i s son variables aleatorias independientes con distribución Normal, con media cero y varianza σ^2 . Las e_i s representarían los errores involu-

crados en la medición de las θ_i s. Esto es, la variabilidad de las mediciones alrededor de una tendencia central (ya que la esperanza de las e_i s es cero). Dicha tendencia central es T_1 dentro de la capa de mezcla y $T_0 + \gamma(z_i - h)$ en la parte superior de la atmósfera.

El modelo estadístico, pues, tiene 5 parámetros: $T_1, T_0, \gamma, h, \sigma^2$. De estos, los parámetros con mayor interés son h (la altura de la capa de mezcla), T_1 y T_0 . Si las alturas se registran en forma creciente, la verosimilitud puede ser expresada como:

$$p(\boldsymbol{\theta} \mid T_1, T_0, \gamma, h, \sigma^2) = \prod_{i=1}^n p(\theta_i \mid T_1, T_0, \gamma, h, \sigma^2) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^n \sigma^n} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \left(\sum_{i=1}^m (\theta_i - T_1)^2 + \sum_{i=m+1}^n (\theta_i - (T_0 + \gamma(z_i - h)))^2 \right) \right\}$$

donde $z_m \leq h$ y $z_{m+1} > h$. A grandes rasgos podemos decir que, una vez teniendo una distribución inicial (*a priori*) para los parámetros, $p(T_1, T_0, \gamma, h, \sigma^2)$, podremos calcular la distribución posterior de estos parámetros dadas las observaciones $\boldsymbol{\theta}$. Esto es, siguiendo el teorema de Bayes,

$$p(T_1, T_0, \gamma, h, \sigma^2 \mid \boldsymbol{\theta}) \propto p(\boldsymbol{\theta} \mid T_1, T_0, \gamma, h, \sigma^2) p(T_1, T_0, \gamma, h, \sigma^2).$$

La distribución inicial deberá de captar varios hechos conocidos acerca de los parámetros, independientemente de la forma concreta que decida usarse y la información particular disponible en cada caso. Dentro de esto podemos anotar que,

- $h > 0$,
- $0 < T_1 < T_0$ y
- $\gamma > 0$,

dadas las características del problema descritas en la sección anterior.

De aquí tendríamos que integrar la distribución posterior conjunta con respecto a T_1, T_0, γ y σ^2 para obtener la distribución marginal de h ; $p(h \mid \boldsymbol{\theta})$. Equivalentemente para T_1 y T_0 o cualquier otro parámetro de interés. La dificultad de esto, desde luego, dependerá de la forma de la distribución inicial y en general representa un problema no trivial de integración numérica. En

algunos casos, claro, soluciones analíticas serán posibles, como veremos en el punto siguiente.

En estadística, el problema planteado aquí se conoce como un problema de “punto de cambio”. Esto es, el modelo tiene dos secciones diferenciadas dentro de las cuales los datos se explican de manera distinta. Las secciones aquí usadas son las observaciones dentro de la capa de mezcla y dentro de la capa exterior. Los problemas de punto de cambio han sido estudiados por una variedad de autores entre los que destacan Smith y Cook [4], Choy y Broemeling [2], Broemeling [1, Cap. 7], Mendoza [3] y Stephens [5].

En todas las publicaciones mencionadas arriba se supone que la esperanza de las observaciones dados los parámetros (la tendencia central) es lineal por secciones con respecto a la variable independiente (en este caso, las alturas z_{is}). Esto no sucede para el modelo expuesto aquí siendo que no hemos supuesto que $T_1 = T_0$ (ver Figura 1). Lo más probable es que en nuestro problema encontremos una discontinuidad entre secciones. De hecho, sabemos que $T_1 < T_0$. Como veremos, el problema de la discontinuidad entre secciones no representa mayor complicación.

3 La distribución inicial y las posteriores

En esta sección propondremos una solución concreta al problema que nos ocupa. Esto es:

1. Reconsiderar el problema tratando de proponer simplificaciones razonables.
2. En base a 1., establecer la distribución inicial $p(T_1, T_0, \gamma, h, \sigma^2)$.
3. Encontrar la distribución posterior conjunta $p(T_1, T_0, \gamma, h, \sigma^2 \mid \theta)$ y sus marginales.

Con respecto a 1., consideramos que siempre es positivo simplificar el planteamiento inicial de un problema complejo con el afán de hacerlo más manejable y/o claro. “Manejable” aquí significará la posibilidad de encontrar la distribución posterior y sus marginales analíticamente, quedando solamente el cálculo de ciertos parámetros para cada ejemplo.

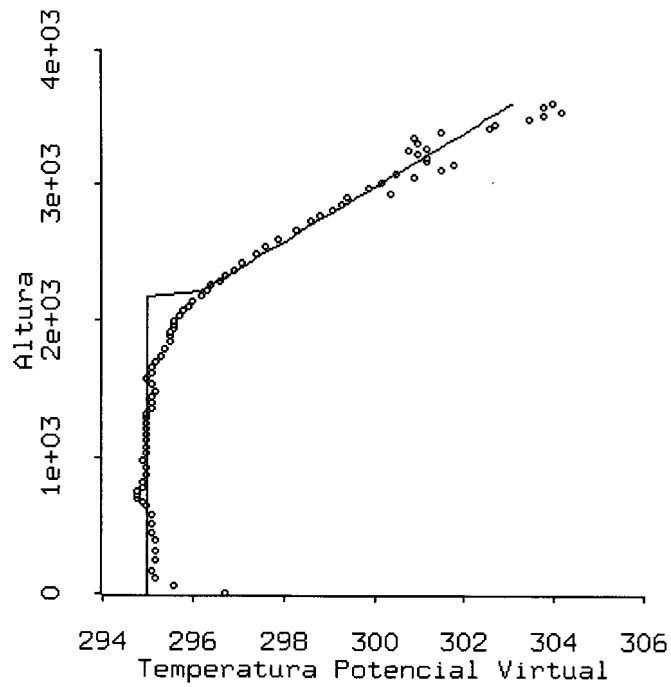


Figura 1: Mediciones obtenidas de la temperatura potencial virtual para las 15:00 horas en Texcoco, Edo. de México, el 26 de agosto de 1994. Se incluye también una tentativa para la tendencia central (en líneas sólidas).

La primera simplificación es suponer que existe una m ($1 \leq m \leq n$) tal que

$$h = z_m.$$

Esto es, suponemos que la altura de mezcla coincide con un punto donde ocurrió una medición de temperatura. Evidentemente esto es muy poco probable. Sin embargo, dada la gran cantidad de datos, el que nosotros supongamos $h = z_m$ solo representa una imprecisión de algunos (50-100) metros. Por otra parte, este supuesto implica que ya no trabajaremos directamente con h (que en principio sería una variable aleatoria continua) sino con el índice m , que será una variable aleatoria discreta. (Esto es lo que Mendoza [3] llama el “punto de cambio muestral”, m , en contraposición al “punto de cambio en el modelo”, h .)

Para simplificar la presentación del modelo introducimos la nueva variable δ que representará el “salto” de la temperatura potencial virtual en la capa de mezcla. Esto es $T_0 = T_1 + \delta$. Las restricciones en los parámetros son simplemente $T_1, \delta, \gamma > 0$.

El modelo quedaría de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \theta_i &= T_1 + e_i && \text{si } i \leq m, \\ \theta_i &= T_1 + \delta + \gamma(z_i - z_m) + e_i && \text{si } i > m. \end{aligned}$$

Dado este nuevo planteamiento es muy útil establecer nuestro modelo en forma matricial. Sea

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta} &= [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]', \\ \mathbf{e} &= [e_1, e_2, \dots, e_n]' \text{ y} \\ \boldsymbol{\beta} &= [T_1, \delta, \gamma]' \end{aligned}$$

entonces,

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{X}(m)\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e};$$

donde

$$\mathbf{X}(m) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & z_{m+1} - z_m \\ 1 & 1 & z_{m+2} - z_m \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & z_n - z_m \end{bmatrix}.$$

3.1 La distribución inicial

Los parámetros en nuestro modelo simplificado son β, m, σ^2 . Vamos a suponer que

$$p(\beta, m, \sigma^2) = p(\beta, \sigma^2)p(m).$$

Esto es, m , *a priori*, es independiente de β y σ^2 , y $p(m)$ es cualquier función de probabilidad con puntos de masa en $m = 1, 2, \dots, n$. Siendo que m es una variable aleatoria discreta, cualquier información acerca de esta puede ser expresada con $p(m)$.

El análisis conjugado usual en este caso consiste en suponer que $p(\beta, \sigma^2)$ es una Normal-Gamma multivariada. Este análisis tiene grandes ventajas, una de las principales es que las distribuciones posteriores son relativamente fáciles de obtener y quedan definidas en términos de sumas ponderadas de Normal-Gammas. Sin embargo, y en términos estrictos, no es posible establecer las condiciones para los parámetros $T_1, \delta, \gamma > 0$ usando una distribución Normal-Gamma para β, σ^2 . En aras de mantener la simplicidad en nuestro análisis vamos a suponer una distribución no informativa para β, σ^2 , confiando en que las restricciones en los parámetros serán captadas por la distribución posterior dada la gran cantidad de datos (típicamente 80-100 observaciones por sondeo). Consideremos entonces la inicial (impropia) no informativa de Jeffreys

$$p(\beta, \sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma^2};$$

vea Broemeling [1, Cap. 1], Mendoza [3].

3.2 Las posteriores

Dada la definición de arriba para la distribución inicial y usando Broemeling [1, Cap. 7], es fácil ver que,

$$p(m | \boldsymbol{\theta}) \propto D(m)^{-n/2} |\mathbf{Q}(m)|^{-1/2} p(m)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}(m) &= \mathbf{X}(m)' \mathbf{X}(m), \\ D(m) &= \frac{1}{2} \{ \boldsymbol{\theta}' \boldsymbol{\theta} - \mathbf{q}(m)' \mathbf{Q}(m) \mathbf{q}(m) \} \text{ y} \\ \mathbf{q}(m) &= \mathbf{Q}(m)^{-1} (\mathbf{X}(m)' \boldsymbol{\theta}). \end{aligned}$$

También es fácil ver que,

$$p(\boldsymbol{\beta} | \boldsymbol{\theta}) = \sum_{m=1}^{n-1} p(m | \boldsymbol{\theta}) t_3[n, \mathbf{q}(m), \mathbf{B}(m)](\boldsymbol{\beta})$$

donde $t_3[n, \mathbf{q}(m), \mathbf{B}(m)]$ es una densidad t trivariada con n grados de libertad, vector de medias $\mathbf{q}(m)$ y matriz de precisión

$$\mathbf{B}(m) = \frac{n}{2} D(m)^{-1} \mathbf{Q}(m).$$

Las marginales de $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \beta_3) = (T_1, \delta, \gamma)$ son

$$p(\beta_i | \boldsymbol{\theta}) = \sum_{m=1}^{n-1} p(m | \boldsymbol{\theta}) t[n, q_i(m), B_i(m)](\beta_i), \quad (1)$$

donde $t[n, q_i(m), B_i(m)]$ es una densidad t univariada con n grados de libertad, media $q_i(m)$ y precisión $B_i(m)$; $\mathbf{q}(m) = [q_i(m)]$ y

$$\begin{aligned} B_1(m) &= b_{11} - \begin{bmatrix} b_{12} & b_{13} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{22} & b_{23} \\ b_{32} & b_{33} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} b_{21} \\ b_{31} \end{bmatrix}, \\ B_2(m) &= b_{22} - \begin{bmatrix} b_{21} & b_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{13} \\ b_{31} & b_{33} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} b_{12} \\ b_{32} \end{bmatrix}, \\ B_3(m) &= b_{33} - \begin{bmatrix} b_{31} & b_{32} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} b_{13} \\ b_{23} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

donde $\mathbf{B}(m) = [b_{ij}]$.

Parámetro	Valor esperado
T_1	295.16 K
δ	-0.1716 K
γ	0.0052 K/m

Tabla 1: Valores esperados posteriores para los parámetros en nuestro modelo. Sondeo atmosférico llevado a cabo en Texcoco, México, a las 15:00 del 26 de agosto de 1994.

4 Ejemplo

En esta sección analizaremos los datos presentados en la Figura 1 correspondientes a un sondeo atmosférico llevado a cabo en Texcoco, México, a las 15:00 del 26 de agosto de 1994. Se consideró una distribución no informativa para β, σ^2 , como se explicó arriba y una distribución inicial uniforme para m ($p(m) = 1/87$ para $m = 1, 2, \dots, 87$). Los cálculos explicados en la sección anterior fueron implementados en una computadora utilizando el lenguaje LISP-STAT.

De la sección anterior notamos que $E[\beta] = \sum_{m=1}^{n-1} p(m | \theta) q(m)$, usando esto calculamos los valores esperados posteriores para T_1 , δ y γ que presentamos en la Tabla 1.

El valor más probable para m es $m = 46$ con una probabilidad de 0.2292, que corresponde a una altura de 2067 metros. El intervalo con probabilidad de 0.95 que acumula las mayores probabilidades para m corresponde a las alturas de 1972 a 2146 metros. También, usando $\hat{\beta} = E[\beta]$ graficamos $\hat{\theta} = X(46)\hat{\beta}$ junto con los datos y $p(m | \theta)$ (con una translación y cambio de escala apropiados) para ilustrar el nivel de incertidumbre en la estimación de la altura de la capa de mezcla; vea la Figura 2.

Por último, calculamos las marginales posteriores para T_1 , δ y γ usando (1) las cuales presentamos en las Figuras 3, 4 y 5. Nótese que, claramente, $T_1, \gamma > 0$ con altísima probabilidad. En este caso la información inicial $T_1, \gamma > 0$, que no incluimos en nuestro análisis, fue correctamente recuperada (confirmada) por la distribución posterior. Sin embargo, el análisis posterior no recuperó (no confirma) la consideración inicial, que no incluimos en nuestro análisis, de que $\delta > 0$, como se ve claramente en la Figura 4. De hecho,

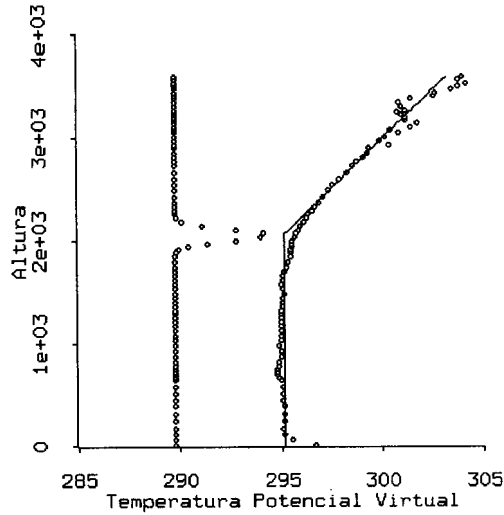


Figura 2: Modelo estimado, datos y distribución posterior para m , del ejemplo estudiado (vea texto).

$$P(\delta \leq 0 \mid \theta) = 0.8025.$$

Vemos entonces que el uso de una distribución inicial de referencia tiene el problema de no incorporar correctamente la información $\delta > 0$. Sin embargo la distribución posterior de δ está bastante concentrada alrededor del cero. Nos atreveríamos a predecir que, aun cambiando la estructura de la distribución inicial para incluir explícitamente que $\delta > 0$, y pasando por todas las complicaciones que esto llevaría, los resultados finales, muy en especial la distribución $p(m \mid \theta)$, no cambiarían mucho. Fundamos en esto nuestra confianza en la robustez del método desarrollado aquí para calcular $p(m \mid \theta)$. Desde luego, no estaría de más una confirmación de esto incorporando explícitamente $\delta > 0$ como parte de nuestra información inicial.

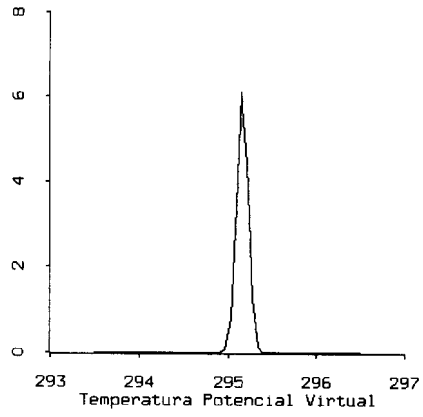


Figura 3: Densidad posterior para T_1 .

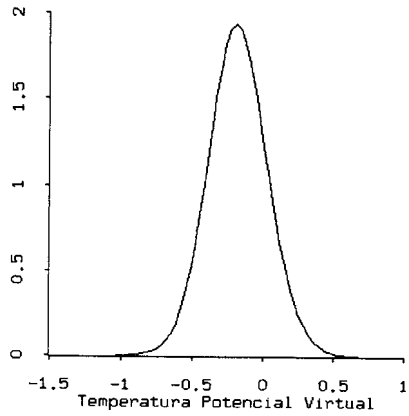


Figura 4: Densidad posterior para δ .

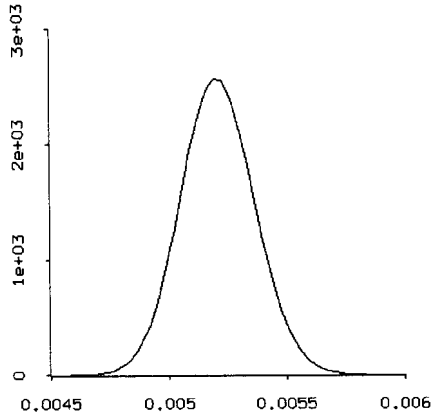


Figura 5: Densidad posterior para γ .

5 Perspectivas

Pensamos que las perspectivas acerca de este problema se dividen en dos; de corto y de largo plazo.

Indudablemente que a corto plazo será necesario estudiar otros sondeos atmosféricos para entender mejor el comportamiento de las técnicas aquí expuestas. También será necesario reconsiderar el uso de la distribución inicial de referencia para β, σ^2 , como fué explicado al final de la sección anterior.

A largo plazo, y una vez teniendo un modelo estadístico ratificado para la estimación de la altura de la capa de mezcla, h , partiríamos a preguntarnos sobre la *evolución* de ésta. Esto es, la estimación de h considerada aquí es válida para un lugar y tiempo determinados. Es de gran interés estudiar como cambia h en el tiempo y en el espacio; su *evolución* espacio-temporal. Esto nos daría, por un lado, una serie de tiempo y, por otro, un proceso espacial. Tendríamos entonces que entender el proceso $h_t(\mathbf{x})$; la altura de la capa de mezcla en distintas posiciones y tiempos. Esto parece ser un problema muy complejo y muy interesante, sea desde el punto de vista físico o desde el punto de vista estadístico.

6 Bibliografía

- [1] Broemeling L.D. (1985) “Bayesian analysis of linear models”, Marcel Dekker, Inc. New York.
- [2] Choy J.H.C y Broemeling L.D. (1980) “Some Bayesian inferences for a changing linear model”, *Technometris*, **(22)**1, p. 71 – 78.
- [3] Mendoza M. (1990) “Sobre el análisis Bayesiano de modelos de regresión con puntos de cambio”, *Aportaciones Matemáticas, Comunicaciones* **(8)**, p. 241 – 247.
- [4] Smith A.F.M y Cook D.G (1980) “Straight lines with a change-point: A Bayesian analysis of some renal transplant data”, *Applied Statistics*, **(29)**2, p. 180 – 189.
- [5] Stephens D. (1994) “Bayesian retrospective multiple-changepoint identification” *Applied Statistics*, **(43)**, p. 159 – 178.

