

01170



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

PROGRAMA DE MAESTRIA Y DOCTORADO EN INGENIERIA

**COMPORTAMIENTO DINAMICO DE LOZONO MEDIANTE
EL ANALISIS NO LINEAL DE SISTEMAS DINAMICOS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

**MAESTRO EN INGENIERIA
(ELECTRICA)**

PRESENTA:

FERNANDO BERISTAIN

DIRECTOR DE TESIS:

M. C. GUILLERMO VAZQUEZ COUTIÑO



MEXICO, D. F.

JUNIO 2005

m345696



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.
NOMBRE: FERNANDO BERISTAIN

FECHA: 22 JUNIO 2005

FIRMA: Fernando

*Con todo mi amor, dedico este trabajo a mis hijos:
Abraham, Eva e Isaac*

*Para decirles que, cuando algo se anhela,
Nunca es tarde para alcanzar la meta.*

Agradezco al M.C. Guillermo Vázquez Coutiño
Por la dirección de este trabajo.

Mi agradecimiento a los miembros del jurado,
Por sus valiosas aportaciones.

Un Especial agradecimiento al
Dr. Luís Álvarez-Icaza Longoria
Por sus valiosos comentarios.

ÍNDICE

| | | |
|---------|---|----|
| | Resumen | 1 |
| | Introducción | 2 |
| | Capítulo I | 10 |
| 1.1 | Modelos de contaminación atmosférica | 10 |
| 1.1.1 | La atmósfera | 10 |
| 1.2 | Generalidades de la contaminación del aire | 11 |
| 1.2.1 | Principales contaminantes del aire | 12 |
| 1.2.2 | El agua en la atmósfera | 13 |
| 1.2.3 | Índice de contaminación | 14 |
| 1.3 | Comportamiento de la atmósfera | 15 |
| 1.3.1 | Escalas de transporte en la atmósfera | 15 |
| 1.4 | Problemas de contaminación en zonas urbanas | 16 |
| 1.5 | Fenómenos implicados en transporte de contaminantes atmosféricos | 17 |
| 1.6 | Tipos de modelos de calidad del aire | 18 |
| 1.6.1 | Modelos determinísticos | 18 |
| 1.6.2 | Modelos probabilísticos, de correlación o estadísticos | 18 |
| 1.6.3 | Modelos de dispersión o difusión | 18 |
| 1.6.3.1 | Modelos Eulerianos y Lagrangianos | 20 |
| 1.7 | Transformación fotoquímica de los contaminantes atmosféricos en la formación del ozono | 23 |
| 1.7.1 | Reacciones en fase gas | 24 |
| 1.7.2 | Reacciones en fase acuosa | 24 |
| 1.7.3 | Análisis de mecanismos de reacciones fotoquímicas en la atmósfera, para la formación del smog fotoquímico u ozono | 25 |
| 1.7.3.1 | Mecanismo de reacción generalizada de Seinfeld para la formación del smog fotoquímico | 27 |
| | Capítulo II | 31 |
| 2.1 | Medición de los índices de contaminación | 31 |
| 2.1.1 | El índice IMECA | 31 |
| 2.2 | El sistema de monitoreo atmosférico (SIMAT) | 32 |
| 2.2.1 | Red manual de monitoreo atmosférico (REDMA) | 32 |
| 2.2.2 | Red de depósito atmosférico (REDDA) | 33 |
| 2.2.3 | Red meteorológica (REDMET) | 34 |
| 2.2.4 | Red automática de monitoreo atmosférico (RAMA) | 35 |
| 2.2.5 | Algoritmos para el cálculo del IMECA | 36 |
| 2.2.6 | Unidades de medición | 37 |
| | Capítulo III | 40 |
| 3.1 | Metodología de análisis de sistemas dinámicos | 40 |
| 3.1.1 | Introducción a los sistemas dinámicos | 40 |
| 3.1.2 | Sistemas dinámicos simbólicos | 40 |
| 3.1.3 | Sistemas de tiempo discreto | 41 |
| 3.1.4 | Sistemas de tiempo continuo | 42 |
| 3.2 | Espacio Fase | 43 |

CONTINUA ÍNDICE

| | | |
|-------|--|-----|
| 3.3 | Mapeo | 44 |
| 3.4 | Espacio fase y mapeo de retorno | 44 |
| 3.5 | Atractor y atractor extraño | 45 |
| 3.6 | Dependencia de las condiciones iniciales | 51 |
| 3.7 | Fractal | 52 |
| 3.8 | Dimensión de capacidad | 55 |
| 3.9 | Dimensión de correlación | 58 |
| 3.10 | Exponente de Lyapunov | 60 |
| 3.11 | Entropía de Kolmogorov | 62 |
| 3.12 | Transformada de Fourier | 63 |
| 3.13 | Tabulación de resultados | 67 |
| | Capítulo IV | 69 |
| 4 | Análisis del comportamiento dinámico del ozono | 69 |
| 4.1 | Registros de datos | 69 |
| 4.2 | Selección de las estaciones de monitoreo | 69 |
| 4.3 | Análisis | 71 |
| 4.3.1 | Gráficos de recurrencia visual | 71 |
| 4.4 | Detección de fluctuaciones de nivel por el método de conteo de cuadros de nivel | 73 |
| 4.4.1 | Tiempo de retraso y dimensión incrustada | 77 |
| 4.4.2 | Tiempo de retraso | 77 |
| 4.4.3 | Información mutua | 78 |
| 4.4.4 | Determinación de la dimensión incrustada | 78 |
| 4.4.5 | Algoritmo para los vecinos falsos más cercanos | 79 |
| 4.5 | Establecimiento del gráfico de recurrencia visual | 80 |
| 4.5.1 | Manejo de los parámetros de dimensión incrustada y tiempo de retraso | 81 |
| 4.5.2 | Validación del método de recurrencia visual | 83 |
| 4.6 | Introducción del método de conteo de cuadros de nivel en la detección de fluctuaciones | 84 |
| 4.7 | Otros métodos para el análisis del comportamiento dinámico del ozono | 88 |
| 4.7.1 | Entropía espacio temporal | 89 |
| 4.7.2 | Frecuencias dominantes | 92 |
| 4.7.3 | Dimensión de correlación | 93 |
| 4.7.4 | Entropía de Kolmogorov | 94 |
| 4.7.5 | Exponente de Lyapunov | 95 |
| 4.7.6 | Espectro de Lyapunov | 96 |
| 4.7.7 | Atractor en el espacio-fase | 97 |
| 4.8 | Aplicación de los métodos a las estaciones de monitoreo seleccionadas | 100 |
| 4.9 | Análisis global del sistema dinámico formado por el ozono en el Valle de México | 104 |
| 4.9.1 | Resultados del análisis de recurrencia visual | 104 |

CONTINUA ÍNDICE

| | | |
|-------|---|-----|
| 4.9.2 | Resultados del análisis de la entropía espacio – temporal | 105 |
| 4.9.3 | Resultados del análisis de la frecuencia dominante | 105 |
| 4.9.4 | Resultados del análisis de la dimensión de correlación | 107 |
| 4.9.5 | Resultados del análisis de la entropía de Kolmogorov (K) | 108 |
| 4.9.6 | Resultados del análisis del exponente de Lyapunov | 108 |
| 4.9.7 | Resultados del análisis del espectro de Lyapunov | 108 |
| 4.9.8 | Resultados del análisis del atractor en el espacio –fase | 109 |
| | Conclusiones | 111 |
| | Referencias | 120 |

Índice de Figuras

| | | |
|------|---|----|
| 1.1 | Capas atmosféricas | 10 |
| 1.2 | Fenómenos presentes en el transporte de un penacho gaseoso en la atmósfera | 17 |
| 1.3 | Solución Euleriana y solución Lagrangiana | 20 |
| 2.1 | Función lineal del IMECA | 39 |
| 3.1 | Gráfica de: $y=2x(1-x)$ | 41 |
| 3.2 | Diferentes simulaciones de la ecuación logística para diversos valores de c | 45 |
| 3.3 | Comportamiento de la ecuación logística para $C = 3.99$ y dos condiciones iniciales muy parecidas | 46 |
| 3.4 | Mapas de retorno de primer orden para la ecuación logística para diferentes valores de c | 47 |
| 3.5 | Mapas de retorno de orden 1, 2, 3 y 4 para $c = 3,99$ en el caso de la ecuación logística | 48 |
| 3.6 | Efecto del ruido sobre los mapas de retorno | 49 |
| 3.7 | Tipos de atractores | 50 |
| 3.8 | Triángulo de Sierpinski | 53 |
| 3.9 | Copo de nieve de Koch | 53 |
| 3.10 | Costa de Gran Bretaña | 54 |
| 3.11 | Cubriendo una curva, un plano y un cubo sólido con cubos | 56 |
| 3.12 | Explicación gráfica del significado del exponente de Lyapunov | 60 |
| 3.13 | Ejemplo de vibración periódica | 63 |
| 3.14 | Representación gráfica de los coeficientes de Fourier | 65 |
| 4.1 | Ejemplo de gráfico de control mostrando niveles de fluctuación | 74 |
| 4.2 | Gráfico de recurrencia del gráfico de control de la figura 4.1 | 75 |
| 4.3 | Serie de tiempo de los datos de ozono en la estación Merced | 76 |
| 4.4 | Gráfico de Información Mutua Promedio, utilizado para calcular el tiempo de retraso | 78 |
| 4.5 | Gráfico de "Global False Nearest Neighbors" para el cálculo de la Dimensión incrustada Global Óptima | 79 |
| 4.6 | Gráficos de recurrencia visual, para ozono, trazados con los valores de dimensión incrustada de 1 y tiempo de retraso de 0, dados inicialmente por el programa. | 80 |
| 4.7 | Gráficos de Recurrencia visual. (A) representa al seno con una Dimensión incrustada de 1 y un Tiempo de Retraso de 0; (B): serie de Ozono para la estación Cerro de la estrella con una dimensión incrustada de 36 y un Tiempo de Retraso de 12, en representación Euclidiana y límites locales | 82 |

Continua Índice de Figuras

| | | |
|------|---|-----|
| 4.8 | Gráficos de recurrencia visual correspondientes a (A): serie de la función seno con ruido; (B): seno con ruido y manejando la dimensión incrustada a un valor de 13 manteniendo el tiempo de retraso en 1; (C): serie para "ruido blanco"; (D): serie de "ruido blanco" manejando la dimensión incrustada en 36 y el tiempo de retraso en 12. | 83 |
| 4.9 | Gráfica de recurrencia visual mostrando los niveles de fluctuación | 85 |
| 4.10 | Graficas de recurrencia visual para los niveles de fluctuación del ozono, mostrados en la figura 4.9 | 86 |
| 4.11 | Gráficas de comportamiento dinámico de NOx: Recurrencia Visual y Frecuencia Dominante | 87 |
| 4.12 | Representación del grafico de recurrencia de la función seno en donde se muestra el cálculo de la entropía espacio – temporal; (A): Función seno; (B): Función seno con ruido; (C): Función seno manejando los parámetros de dimensión incrustada y tiempo de retraso | 90 |
| 4.13 | Representación del gráfico de recurrencia visual para los datos de, (A): ozono; y (B): ruido blanco en los que se muestra el valor de la entropía espacio – temporal calculada | 91 |
| 4.14 | Frecuencias dominantes. (A): Datos de ozono en la estación Cerro de la Estrella; (B): Datos caóticos; (C): Datos aleatorios | 92 |
| 4.15 | Dimensión de correlación. (A): Ozono; (B): Seno con Ruido; (C): Caos; (D): Seno | 93 |
| 4.16 | Tendencia de la entropía de Kolmogorov: ozono, seno, seno con ruido y ruido | 95 |
| 4.17 | Espectro de Lyapunov. (A): registros de ozono; (B): Función seno con ruido | 97 |
| 4.18 | Gráficos mostrando los atractores en el espacio fase para. (A): Registros de Ozono en la estación Cerro de la Estrella; (B): función seno; (C): función seno con ruido; (D) Caos. | 99 |
| 4.19 | Comportamiento del ozono y las variables meteorológicas durante una contingencia ambiental en la ZMVM (Fuente: SIMAT. Informe del estado de la calidad del aire y tendencias 2002 | 106 |
| 4.21 | Relación entre la temperatura, el ozono y los productos de nitrógeno | 107 |

Índice de Cuadros

| | | |
|------|---|-----|
| 1.1 | Composición media del aire troposférico limpio (base seca) | 12 |
| 1.2 | Intervalos de concentración de algunos contaminantes atmosféricos, en la troposfera | 14 |
| 1.3 | Mecanismo de reacción generalizado de formación del smog, propuesto por Seinfeld | 28 |
| 1.4 | Ecuaciones diferenciales de los mecanismos de reacción generalizado para la formación de smog fotoquímico | 29 |
| 2.1 | Equipos de medición de la REDMA | 32 |
| 2.2 | Métodos de análisis aplicados | 33 |
| 2.3 | Parámetros y técnicas de análisis en depósito húmedo | 33 |
| 2.4 | Parámetros y técnicas de análisis en depósito seco | 34 |
| 2.5 | Equipo y parámetros de medición de la REDMET | 35 |
| 2.6 | Métodos aplicados en la detección de contaminantes en la RAMA | 36 |
| 2.7 | Parámetros y unidades de medición registrados en el SIMA | 37 |
| 2.8 | Clasificación de la calidad del aire | 38 |
| 2.9 | Intervalos que marca la Norma Oficial Mexicana para los contaminantes | 38 |
| 2.10 | Valores normados para los contaminantes | 39 |
| 3.1 | Iteración de $f(x) = 2x(1-x)$ comenzando con $X_0 = 0.1$ | 42 |
| 3.2 | Resultados esperados de las técnicas sobre datos experimentales | 68 |
| 4.1 | Estaciones seleccionadas para el estudio de la dinámica del ozono | 70 |
| 4.2 | Rangos de la Entropía Espacio – Temporal para las diversas señales | 89 |
| 4.3 | Valores del exponente de Lyapunov | 96 |
| 4.4 | Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación Tacuba | 101 |
| 4.5 | Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación San Agustín | 101 |
| 4.6 | Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación Merced | 102 |
| 4.7 | Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación Hangares | 102 |
| 4.8 | Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación Pedregal | 103 |
| 4.9 | Análisis del comportamiento dinámico de la estación Cerro de la Estrella | 103 |

RESUMEN

La ciencia de la no linealidad, tiene aplicaciones en una amplia variedad de campos, desde la matemática, la física, la biología, y la química, a la ingeniería, la economía, y la medicina. Éste es uno de sus aspectos más excitantes y lo que atrae a investigadores de muchas disciplinas. Mientras los objetos lineales pueden ser enumerados, los no lineales son innumerables y todavía, principalmente, sin clasificación; actualmente no se cuenta con ninguna técnica general para decir si un sistema no lineal particular exhibe la complejidad del caos, o la simplicidad del orden. En el presente trabajo se investiga el mecanismo generador de la serie temporal del ozono, buscando posibles patrones temporales en el comportamiento dinámico. En las décadas pasadas el análisis de datos utilizaba únicamente los métodos (lineales) clásicos, esto ha sido mejorado y enriquecido con nuevos métodos derivados de la teoría del caos. Asimismo, las herramientas para el análisis de los sistemas dinámicos, a través del conocimiento de una serie de datos unidimensionales (series de tiempo experimentales) han sido aplicadas en este trabajo, para tratar de extraer el comportamiento determinista que pudiera estar oculto por la presencia de ruido aleatorio; algunas de estas herramientas son: Análisis de recurrencia visual, el conteo de cuadros de nivel para determinar los niveles de fluctuación, la entropía espacio temporal, el espectro de potencia, la frecuencia dominante, la entropía de Kolmogorov, el exponente y el espectro de Lyapunov.

El presente trabajo es una contribución al estudio del comportamiento de la dinámica no lineal del ozono, como uno de los contaminantes más representativos en la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM). Aplicando diversas herramientas computacionales, incluidos el Análisis de Fourier, el de recurrencia visual, el caótico y el no lineal, los resultados muestran que el comportamiento del dinámico del ozono es periódico o cuasiperiódico. Así mismo se demuestra que la aplicación correcta de las herramientas de análisis computacional, permiten determinar el comportamiento dinámico de cualquier serie de tiempo, que la comparación con series de tiempo con un comportamiento dinámico perfectamente definido, constituyen un elemento que da validez a los resultados obtenidos. Finalmente el método de conteo de cuadros de nivel permite detectar las fluctuaciones que se presentan a través del tiempo y que ésta herramienta, a través de un control más preciso de la información, permitirá establecer la relación entre los diferentes agentes que influyen en la generación de la contaminación por ozono en la zona metropolitana del Valle de México.

INTRODUCCIÓN

En geometría, la linealidad se refiere a los objetos Euclidianos: líneas, planos, el espacio tridimensional, etc. estos objetos parecen lo mismo no importa cómo los examinamos. Un objeto no - lineal, una esfera por ejemplo, parece diferente en escalas diferentes, cuando se mira bastante cerca se parece a un plano, y a una gran distancia se parece a un punto.

En álgebra se define la linealidad en términos de funciones que tienen la propiedad $f(x+y) = f(x)+f(y)$ y $f(ax) = af(x)$ y la no linealidad es definida como la negación de lineal. Esto significa que el resultado de f puede estar fuera de proporción a la entrada x o y ; por ejemplo, para un sistema lineal, si nosotros tenemos dos ceros, $f(x) = 0$ y $f(y) = 0$, entonces automáticamente tenemos un tercer cero $f(x + y) = 0$ (de hecho hay infinitos ceros, la linealidad implica que $f(ax+by) = 0$ para cualquier a y b . Sin embargo, la linealidad es bastante especial, y así tenemos que, casi ningún modelo de un sistema real es verdaderamente lineal, aunque cualquier dimensionalidad finita de modelos no lineales puede convertirse en una dimensionalidad lineal (Strogatz, 1994).

Algunos modelos no lineales se estudian preferentemente como aproximaciones lineales a los modelos reales (Franz, 1988). De la misma manera, algunos sistemas no lineales, que exhiben sorprendentes efectos complejos, nunca serían anticipados por un científico entrenado sólo en el análisis a través de técnicas lineales. Ejemplos sobresalientes de éstos incluyen, bifurcación y caos. En todo caso la no linealidad tiene sus efectos más profundos en los sistemas dinámicos (Kelley, 1955). Así, mientras los objetos lineales pueden ser enumerados, los no lineales son innumerables y todavía, principalmente, sin clasificación; actualmente no se cuenta con ninguna técnica general (y muy pocas especiales) para decir si un sistema no lineal particular exhibe la complejidad del caos, o la simplicidad del orden. Así que no podemos subdividir, todavía, la ciencia de la no linealidad en los subcampos apropiados, esto existe como un todo.

La ciencia no lineal tiene aplicaciones en una amplia variedad de campos, desde las matemáticas, física, biología, y química, a la ingeniería, economía, y medicina. Éste es uno de sus aspectos más excitantes y lo que atrae a investigadores de muchas disciplinas.

La investigación de los sistemas complejos ha revelado que, los procesos no lineales subyacentes deberán ser considerados para entender y modelar estos sistemas. En las décadas pasadas el análisis de datos utilizaba únicamente los métodos (lineales) clásicos, esto ha sido mejorado y enriquecido con nuevos métodos derivados de la teoría del caos. Muchos investigadores han intentado estimar medidas y propiedades no lineales escalando leyes o dimensiones fractales de procesos naturales. Sin embargo, la mayoría de los métodos de análisis de datos no lineal (Kantz y Schreiber, 1997) necesitan de series grandes o datos estacionarios, características que no son típicas de las series de datos que se obtienen de la naturaleza. Además, se ha demostrado que estos métodos funcionan muy bien para los sistemas modelo apropiados; sin embargo, la naturaleza no se puede describir en un sentido meramente Laplaciano, asimismo muchas eventualidades envuelven también la evaluación de la dimensión de las interrelaciones que perturban los procesos naturales. Así, los resultados del análisis de datos se deben considerar con una porción de sano escepticismo. Este hecho es un desafío para desarrollar nuevas técnicas de análisis de datos no lineales.

Un sistema dinámico consiste, en un espacio-fase abstracto o espacio de estados cuyas coordenadas describen el estado dinámico en cualquier instante; y una regla dinámica que especifica la tendencia futura inmediata de todas las variables de estado, dados sólo los valores presentes de esas mismas variables de estado; asimismo, un sistema dinámico es descrito por las condiciones iniciales o el estado del cual parte el sistema (Tufillaro, N.B. et al., 1992)

Los sistemas dinámicos son "deterministas" si hay una única consecuencia en cada estado, "estocásticos" si los resultados se basan en factores probabilísticos y "aleatorios" si carece de todo patrón regular debido a que escapa a cualquier ley que lo forzaría a una secuencia aunque sea levemente repetitiva que podría ser considerada como patrón.

En años recientes los estudios matemáticos de los sistemas dinámicos han demostrado que soluciones simples con ecuaciones no lineales pueden predecir comportamientos complejos en el tiempo y el espacio. Existen ahora muchos ejemplos de ecuaciones que demuestran una amplia variedad de comportamientos desde uno simplemente periódico hasta uno caótico. Un concepto que ha surgido de tales estudios es el de los atractores extraños. Un atractor es un conjunto de puntos o un subespacio en el espacio de estados hacia el cual una "historia de tiempo" se aproxima asintóticamente.

Un sistema dinámico se define como un conjunto de N ecuaciones diferenciales de primer orden en N variables $X = (X_1, \dots, X_N)$, esto determina un punto en el espacio fase, el espacio euclidiano R^N (Ozorio, 1998).

$$dx / dt \equiv \dot{x} = f(x, t)$$

El sistema se considera autónomo si el vector de campo f es independiente del tiempo (t).

Se ha dicho que "Caos es un nombre para cualquier orden que produce confusión en nuestras mentes". Sin embargo, la definición matemática es: ***“Conducta no predecible a largo tiempo en un sistema dinámico determinista debido a la sensibilidad a las condiciones iniciales”***

Debe darse énfasis a que un sistema dinámico determinista es absolutamente predecible dado el conocimiento perfecto de la condición inicial, y siempre es en la práctica predecible en el término corto. La clave para la no predictibilidad a largo plazo, es una propiedad conocida como sensibilidad a las condiciones iniciales (o dependencia sensible a las condiciones iniciales) (Grebogi, 1984).

Como consecuencia de la no predictibilidad a largo plazo, las series de tiempo de los sistemas caóticos pueden aparecer irregulares y desordenadas. Sin embargo, el caos no es definitivamente (como el nombre podría sugerir) el desorden completo; es desorden en un sistema dinámico determinístico que siempre es predecible para tiempos cortos.

Llamamos *Serie de Tiempo* a un conjunto de mediciones de cierto fenómeno o experimento registradas secuencialmente en el tiempo. En muchas áreas del conocimiento las observaciones de interés son obtenidas en instantes sucesivos del tiempo, por ejemplo, a cada hora, durante 24 horas, mensuales, trimestrales, semestrales o bien registradas por algún equipo en forma continua. Uno de los problemas que intenta resolver el análisis de las series de tiempo es el de predicción. Esto es, dada una serie $\{x(t_1), \dots, x(t_n)\}$ los objetivos de interés son describir el comportamiento de la serie, investigar el mecanismo generador de la serie temporal, buscar posibles patrones temporales que permitan sobrepasar la incertidumbre del futuro (Chatfield, 1989).

Hoy en día se requiere conocer el comportamiento futuro de ciertos fenómenos con el fin de planificar, prever o prevenir. La planificación racional exige prever los sucesos del futuro. La previsión, a su vez, se suele basar en lo que ha ocurrido en el pasado. Se tiene pues un nuevo

tipo de inferencia estadística que se hace acerca del futuro de alguna variable o compuesto de variables basándose en sucesos pasados. La técnica más importante para hacer inferencias sobre el futuro con base en lo ocurrido en el pasado, es el análisis de series de tiempo.

En el estudio del comportamiento de las series en las que se da el valor de un dato observado en función del tiempo, se han aplicado diversas técnicas de análisis de los sistemas dinámicos. Una de las herramientas principalmente aplicadas es el retraso de la coordenada “embebida, de incrustación o de inmersión”, nombres dados a la herramienta según el autor consultado, lo que genera una “fotografía” del espacio fase a partir de una serie de datos dando como resultado una representación topológica con la simple medida de una de las coordenadas, digamos $x(t)$, y graficando las coordenadas retrasadas ($x(t)$, $x(t+h)$, $x(t+2h)$) para un h fijo (Sauer, 1994).

Es importante acentuar que el uso de las derivadas, o el retraso de las coordenadas, en la modelación de las series de tiempo, no es nada nuevo, Yule en 1927 utilizó un modelo auto regresivo (AR) para construir un modelo de predicción para el ciclo de las manchas solares. Los modelos auto regresivos no son otra cosa que la aplicación del retraso de las coordenadas a un modelo lineal. Los nuevos aspectos tocados por la teoría del análisis de los sistemas dinámicos son:

- (i) La vista geométrica implicada por el comportamiento temporal y
- (ii) La existencia de “geometrías invariantes”, por ejemplo la dimensión de correlación y el exponente de Lyapunov.

La pregunta entonces no es si el retraso de las coordenadas es útil para el análisis de las series de tiempo, sino si los métodos de reconstrucción preservan la geometría y los invariantes geométricos de los sistemas dinámicos (Sauer, 1994).

De la misma manera, otras herramientas para el análisis de los sistemas dinámicos, a través del conocimiento de una serie de datos unidimensionales (series de tiempo experimentales) se han aplicado para tratar de extraer el comportamiento determinista que pudiera estar oculto por la presencia de ruido aleatorio, algunas de estas son: Análisis de recurrencia visual, entropía espacio temporal, espectro de potencia, frecuencia dominante, y entropía de Kolmogorov.

Uno de los aspectos que representan un reto en el estudio del comportamiento de los sistemas dinámicos es el de la contaminación. La atmósfera es el medio en el que se emiten los contaminantes del aire. Procesos atmosféricos tales como el movimiento del aire (viento) y el intercambio de calor (por ejemplo, la convección y la radiación) determinan el destino de los contaminantes a medida que pasan por las etapas de transporte, dispersión, transformación y remoción. Además, este conocimiento es esencial para entender el destino y transporte de las sustancias contaminantes del aire (Moran et al, 1994).

De acuerdo a la necesidad de caracterizar adecuadamente la situación de deterioro del medio ambiente y de encontrar respuestas satisfactorias sobre la evolución de la contaminación por ozono, en el presente trabajo se analizaron las series de tiempo correspondientes a la concentración de ozono, con el objeto de acercarse al conocimiento de la dinámica y tratar de establecer el comportamiento del sistema dinámico del mencionado contaminante en la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM) saber si es : regular (periódico o multiperiodico), caótico o aleatorio, para esto se estableció el análisis del sistema dinámico, aplicando las herramientas computacionales que establecen y definen gráficamente el comportamiento dinámico de este sistema.

La predicción de los índices de contaminación ha sido uno de los retos más emprendidos, utilizando toda clase de modelos, desde simples modelos estadísticos de regresión, métodos recursivos de interpolación, hasta los modelos numéricos más complicados. La mayoría de estos modelos implican el manejo de un gran número de registros o bases de datos de varios años del contaminante, hasta los que emplean los datos en tiempo real para crear sus estimaciones también en tiempo real, fundamentalmente estos métodos se aplican para tratar de establecer, por medio de correlaciones entre las zonas registradas, los probables valores del contaminante en zonas que presenten características similares a las registradas. La complejidad de estos modelos que requieren del conocimiento de muchas otras variables como son la presión atmosférica, la latitud, longitud, fecha y hora, así como el índice de radiación ultravioleta, entre otros parámetros, hacen ver la complicación para obtener las estimaciones confiables de la contaminación por ozono (Long CS, NOAA, 1996) . En la Zona metropolitana del valle de México, se aplica el modelo MM5 desarrollado por la Universidad Estatal de Pennsylvania y el Centro Nacional de Investigaciones Atmosféricas; este es un modelo de pronóstico atmosférico para 72 horas, adaptado para el pronóstico de ozono y

requiere de un gran número de parámetros como los mencionados más arriba y otros más como la velocidad del viento, altura geopotencial, etc. Además de que el modelo debe procesarse en una supercomputadora. Otros de los métodos aplicados en la predicción de ozono es el de redes neuronales. Al realizar un modelo computacional basado en datos experimentales aparecen graves inconvenientes desde la misma adquisición de los datos. Estos, la mayoría de las ocasiones están incompletos o son imprecisos y no se ajustan al formato de las herramientas de análisis. Por esto mismo, exigen un preprocesamiento previo que en muchos de los casos puede limitar la cantidad de información de los datos, poniendo en riesgo el buen rendimiento del modelo, así entonces se ha observado en el uso de estos modelos que, el hecho de manipular mínimamente la información puede ser un arma de dos filos, puede dar mayor flexibilidad al modelo, pero también falsear la información de entrada con las consecuencias en la fiabilidad de los resultados (Orozco, 2002).

El presente trabajo es una contribución al estudio del comportamiento de la dinámica no lineal del ozono, como uno de los contaminantes más representativos en la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM) aplicando diversas herramientas computacionales, incluidos el Análisis de Fourier, el de recurrencia, el caótico y el no lineal, con la aplicación de estas herramientas, en el presente trabajo se pretende extraer información nueva y útil que pueda encontrarse oculta en los grandes volúmenes de datos, de los registros de la contaminación por ozono.

Debido a que se trata de un campo necesariamente multidisciplinario y que, por otra parte, la información se modifica y se incrementa con rapidez, es importante establecer que los resultados se presenten como productos no acabados de un proceso que se desarrolla en el tiempo.

De acuerdo con todo lo anterior, se considera establecer los siguientes objetivos para el desarrollo del presente trabajo.

Objetivo general:

Adquirir un marco de interpretación para la comprensión de la dinámica no lineal de la contaminación por ozono, y evaluar la validez de algunas herramientas computacionales para establecer el comportamiento de las series de tiempo de Ozono en la Zona Metropolitana del

Valle de México, a través de la utilización de diversos programas de: análisis de recurrencia, caótico y no lineal y el análisis de Fourier.

Objetivos particulares

- Valorar y manejar los grandes volúmenes de datos, para extraer información nueva y útil que pueda encontrarse oculta, sobre la formación de ozono en la ZMVM.
- Aplicación de las herramientas computacionales: análisis de recurrencia, análisis caótico y no lineal y análisis de Fourier que permitan establecer la dinámica no lineal del comportamiento del contaminante ozono en la ZMVM.
- Valorar la eficacia y el alcance de las herramientas aplicadas para definir de manera apropiada el comportamiento dinámico de las series de tiempo en estudio.
- Aplicar la técnica de niveles de conteo de cuadros de nivel en los gráficos de Análisis de Recurrencia Visual para detectar los niveles de fluctuación en las series de tiempo del ozono.

De acuerdo con los objetivos el trabajo se dividió en los siguientes capítulos:

El capítulo I, nos introduce a los modelos de contaminación atmosférica, con la idea de conocer la atmósfera como el medio en el que se desarrolla el fenómeno. Se precisan los términos necesarios para comprender el problema de la contaminación, desde las definiciones de contaminantes primario y secundario, la influencia que tienen sobre las concentraciones de estos tanto los fenómenos meteorológicos como la actividad del ser humano, las escalas de contaminación desde la local a la global y los fenómenos implicados en el transporte de los contaminantes, terminando con los diversos tipos de modelos propuestos de la calidad del aire.

El Capítulo II, Introduce a la problemática de la contaminación ambiental en la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM). Establece la diversidad de los tipos de contaminantes presentes en la ZMVM, describe el sistema de monitoreo atmosférico (SIMAT) y cada una de las redes de monitoreo que lo componen, el tipo de equipos de medición, los principios de operación en los que se basan, los parámetros y técnicas de análisis, los métodos aplicados en la detección para cada contaminante así como el principio de operación en el que se basan, los parámetros y unidades de medición, la localización de las estaciones de monitoreo, la clasificación de la calidad del aire de acuerdo al Índice Metropolitano de la

Calidad del Aire (IMECA), así como los intervalos y valores señalados por la Norma Oficial Mexicana (NOM) para cada contaminante. Finalmente se establecen las características de localización, el entorno y los parámetros monitoreados por cada una de las redes del sistema en las estaciones seleccionadas en el presente trabajo.

Capítulo III. Metodología de análisis. Se establecen las definiciones necesarias para comprender los sistemas dinámicos y encontrar el comportamiento de las series de tiempo de ozono. Retraso de la coordenada embebida, de incrustación o de inmersión, espacio fase y su reconstrucción, atractor y atractor extraño, dimensión fractal con la aproximación de Grassberger y Procaccia también llamada dimensión de correlación, dimensión y exponente de Lyapunov, espectro de Lyapunov, dimensión de Capacidad o dimensión de Hausdorff, entropía de Kolmogorov, gráficos de recurrencia visual, detección de fluctuaciones de nivel por el método de conteo de cuadros de nivel y finalmente el Análisis de Fourier. Introduciendo en todos los casos las técnicas de representación gráfica del Análisis del comportamiento de señales (caóticas, periódicas, aleatorias, etc.).

Capítulo IV. En este capítulo se establecerá la metodología aplicada en el manejo de las bases de datos, los criterios aplicados para la selección de las estaciones de monitoreo del contaminante, se constituirá la metodología de análisis de acuerdo a la comparación de los comportamientos dinámicos de sistemas que presentan comportamientos dinámicos bien establecidos con los resultados del análisis y de la representación gráfica que presentan las series de tiempo en estudio, asimismo se aplicará el método de conteo de cuadros de nivel para detectar los niveles de fluctuación, lo que permitirá tener un acercamiento al comportamiento dinámico de las series de tiempo del ozono en la zona metropolitana del valle de México

Finalmente, se establecerán las conclusiones y recomendaciones.

CAPITULO I

1.1. MODELOS DE CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA

1.1.1. La atmósfera

Cuando se estudia el problema de la contaminación atmosférica, en primer lugar, es necesario conocer el medio en que se desarrolla. Clásicamente, la atmósfera se divide en diferentes capas, con distinta composición y características físicas: la tropósfera, la estratósfera, la mesósfera y la termósfera (Figura 1.1).

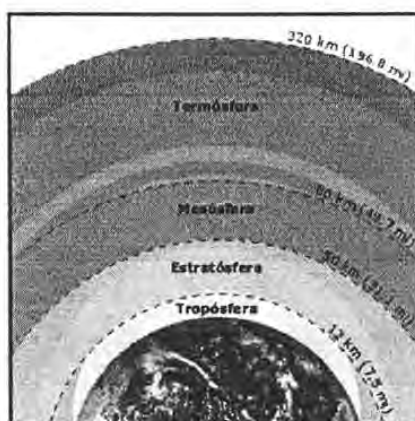


Figura 1.1. Capas atmosféricas (Moran y Morgan, 1994)

Las dos capas superiores, termósfera y mesósfera, presentan concentraciones de gases muy inferiores al resto, aunque son fotoquímicamente activas: absorben y dispersan la energía solar, por lo que influyen directamente en la radiación que alcanzan las capas inferiores.

La estratósfera es la capa inmediatamente inferior, mucho menos extensa, pero con una concentración mayor de especies químicamente activas, radicales libres e iones. Desde el punto de vista de la contaminación atmosférica, es la capa en la que se desarrollan los procesos de transporte y transformación global de contaminantes, y también en esta capa se produce absorción y dispersión de la energía solar. En la zona inferior de esta capa, a poco más de 10 km sobre la superficie terrestre, existe una concentración relativamente elevada de O_3 , que da lugar a la denominación de esta región como capa de ozono estratosférico. En esta capa se produce la absorción de la mayor parte de la radiación UV.

Por último, la capa inferior próxima a la superficie terrestre es la tropósfera, y es la que, salvando los efectos de contaminación a escala global como la reducción del O₃ estratosférico o el efecto invernadero, permite caracterizar si tenemos una atmósfera limpia o contaminada; está compuesta por casi tres cuartos de la masa atmosférica y contiene casi todos los componentes hídricos de la atmósfera (vapor, nubes y precipitación) y es donde se encuentran las masas de aire, los frentes y las tormentas, es la capa más agitada y la que determina el clima de la Tierra. La profundidad de la tropósfera cambia constantemente debido a variaciones de la temperatura atmosférica. Desde el punto de vista del transporte de contaminantes, en esta capa, la zona inferior de la tropósfera, denominada capa límite atmosférica, es la zona influida directamente en su flujo por la corteza terrestre, por lo que tiene su propio estudio y caracterización (Moran y Morgan, 1994).

Son la tropósfera, y especialmente la capa límite atmosférica, las zonas de la atmósfera de mayor interés general para el estudio, caracterización y control de la contaminación atmosférica, ya que casi toda la contaminación del aire en exteriores se emite en la tropósfera. El transporte de la contaminación del aire está determinado por la velocidad y la dirección de los vientos; la tasa de dispersión depende de la estructura térmica de la atmósfera, así como de la agitación mecánica del aire a medida que se desplaza sobre los diferentes accidentes geográficos. La radiación solar y la humedad, así como otros componentes de la atmósfera, causan un impacto en la transformación de las sustancias contaminantes emitidas en el aire. La remoción de los contaminantes no sólo depende de sus características sino también de fenómenos climáticos como la lluvia, la nieve y la niebla (Ahrens, 1993).

1.2. Generalidades de la contaminación del aire

El término contaminación se define como: "La acción o hecho de ensuciar: la condición de estar sucio". En nuestro caso definiremos, "contaminante atmosférico" como aquello que altera la composición geoquímica media de la atmósfera.

A partir de la definición de contaminante atmosférico, se introduce el término de composición geoquímica media del aire. Esta composición media trata de definir el contenido y proporción de los diferentes constituyentes de un aire limpio hipotético, cuya composición no hubiese sido alterada ya por la actividad humana: es, por tanto, una composición hipotética, desconocida. Debemos contentarnos, pues, con tomar como aire limpio de referencia una

composición media, que puede ser aproximadamente la composición del aire troposférico en las zonas polares. Esta composición media, sobre base seca, se muestra en el cuadro 1.1. Los principales constituyentes del aire son el N₂ y el O₂: el primero es un gas inerte, en condiciones normales de presión y temperatura, en tanto que el segundo participa como reactante en reacciones de oxidación que, generalmente, han de ser catalizadas para que tengan lugar, por algún agente externo (Milford, et al.,1992).

Cuadro 1.1. Composición media del aire troposférico limpio (base seca) (Jacob,1999; Smoluchowsky,1986)

| | ppm (vol.) | g/m ³ |
|------------------|------------|-------------------------------|
| N ₂ | 780000 | 8.95 x 10 ⁸ |
| O ₂ | 209400 | 2.74 x 10 ⁸ |
| Agua | - | - |
| Ar | 9300 | 1.52 x 10 ⁷ |
| CO ₂ | 315 | 5.67 x 10 ⁵ |
| Ne | 18 | 1.49 x 10 ⁴ |
| He | 5.2 | 8.50 x 10 ² |
| CH ₄ | 1.0 - 1.2 | 6.56 - 7.87 x 10 ² |
| Kr | 1.0 | 3.43 x 10 ³ |
| N ₂ O | 0.5 | 9.00 x 10 ² |
| H ₂ | 0.5 | 4.13 x 10 |
| Xe | 0.08 | 4.29 x 10 ² |
| VOCs | 0.02 | - |

1.2.1. Principales contaminantes del aire.

El aire puro es una mezcla gaseosa compuesta por un 78% de nitrógeno, un 21 % de oxígeno y un 1% de diferentes compuestos tales como el argón, el dióxido de carbono y el ozono. Entendemos pues por contaminación atmosférica cualquier cambio en el equilibrio de estos componentes, lo cual altera las propiedades físicas y químicas del aire.

Los principales contaminantes del aire se clasifican en:

- Contaminantes primarios.
- Contaminantes secundarios.

Los contaminantes primarios, son los que permanecen en la atmósfera tal y como fueron emitidos por la fuente. Para fines de evaluación de la calidad del aire se consideran: óxidos de

azufre, monóxido de carbono, óxido de nitrógeno, hidrocarburos y partículas suspendidas (monografias.com, 2004).

Los contaminantes secundarios, son los que han estado sujetos a cambios químicos, o bien, son el producto de la reacción de dos o más contaminantes primarios en la atmósfera. Entre ellos destacan los oxidantes fotoquímicos y algunos radicales de corta existencia como el ozono (Quadri y Sánchez, 1994; Smoluchowsky, 1986).

Niveles de concentración

La definición de contaminación atmosférica exige la definición de niveles de concentración de los contaminantes atmosféricos para los cuales se producen efectos dañinos sobre el hombre, los animales, la vegetación o los materiales, es decir, se hace necesario definir los niveles de calidad del aire. Por lo anterior, para determinar si una atmósfera está contaminada es necesario conocer:

1. El medio atmosférico y su composición media.
2. Los contaminantes atmosféricos: Distintas sustancias que pueden estar presentes en la atmósfera en cantidades anormales para dicha composición media.
3. Los efectos que pueden causar los contaminantes atmosféricos sobre el medio ambiente.

1.2.2. El agua en la atmósfera

Desde el punto de vista de la composición del denominado aire limpio, es más importante su contenido en sustancias que no se encuentran en fase gas, especialmente el agua (líquida y vapor), y en menor proporción compuestos orgánicos y partículas sólidas.

Por encima de su temperatura de condensación, el agua se presenta como vapor y, cuando la temperatura del aire desciende por debajo de la temperatura de condensación del agua, si el aire está saturado de vapor de agua, parte de este vapor pasa a líquido. Para cada concentración de vapor de agua en el aire, existe una temperatura de condensación por debajo de la cual parte del vapor de agua pasa a líquido. Estos cambios de fase pueden verse facilitados por la presencia de materia condensada (partículas sólidas o líquidas) que sirven como núcleos de formación de gotas de agua, que constituyen las nubes. En definitiva, la

variación en el contenido de vapor de agua del aire puede ser muy grande, desde el 0% (aire seco) hasta el 4%.

Estas variaciones son importantes ya que:

1. El aporte o consumo de energía calorífica que se produce en los cambios de fase vapor/líquido, altera el equilibrio energético de la atmósfera.
2. La reactividad que presentan algunos contaminantes atmosféricos (SO_2 , compuestos inorgánicos) con y en el agua.

De acuerdo a lo anterior, para que una sustancia sea considerada contaminante atmosférico su concentración en la atmósfera deberá ser superior a la que normalmente presenta (cuadro 1.2), y eso incluye a aquellas sustancias que no deben estar presentes en el aire limpio.

Cuadro 1.2. Intervalos de concentración de algunos contaminantes atmosféricos, en la tropósfera (Jacob, 1999; Smoluchowsky, 1986)

| | Concentración , ppb | |
|----------------|---------------------|------------------|
| | Aire limpio | Aire contaminado |
| SO_2 | 1-10 | 20-200 |
| CO | 120 | 1000-10000 |
| NO | 0.01-0.05 | 50-750 |
| NO_2 | 0.1-0.5 | 50-250 |
| O_3 | 20-80 | 100-500 |
| HNO_3 | 0.02-0.3 | 3-50 |
| NH_3 | 1 | 10-25 |
| HCHO | 0.4 | 20-50 |
| HCOOH | - | 1-10 |
| HNO_2 | 0.001 | 1-8 |
| NMHC | - | 500-1200 |

1.2.3. Índice de contaminación

Una cuestión diferente será el índice de contaminación, es decir, de deterioro de la calidad del aire, que generará esa sustancia, que dependerá de su concentración y de los efectos que pueda causar sobre el medio.

Los aerosoles, o partículas sólidas o líquidas presentes en la atmósfera, constituyen por su parte un tipo de contaminantes especiales que, además de sus posibles efectos perjudiciales de

tipo químico, presentan efectos de tipo físico derivados de su tamaño, que condiciona también su desplazamiento en el flujo atmosférico.

1.3. Comportamiento de la atmósfera

En cuanto al comportamiento general de la atmósfera, desde el punto de vista químico, el aire troposférico es una mezcla de gases esencialmente oxidantes, fundamentalmente debido a la presencia de O_2 y al aporte de energía solar. Este comportamiento marcará la mayoría de las reacciones que tienen lugar en la atmósfera.

Desde el punto de vista físico, el aire se comporta como un fluido en régimen turbulento, en lo que se denomina flujo libre, es decir, no encerrado por paredes sólidas. Los factores que condicionan este flujo son:

1. El movimiento de la Tierra.
2. La orografía y rugosidad de la superficie terrestre.
3. Las características reológicas del aire (densidad media = 1.204 kg/m^3 , viscosidad cinemática = $0.1 \text{ kg/m}\cdot\text{s}$).
4. Los fenómenos de intercambio de energía que se desarrollan en su seno, como los cambios de fase del agua, el aporte de energía solar y de la superficie terrestre y los océanos.

Debido a la naturaleza oxidante de la atmósfera (casi un 21% de O_2), el principal mecanismo de eliminación de gases extraños es la oxidación, que en diversos casos (SO_2 , NO_x) se ve favorecida por la radiación solar y la presencia de oxidantes más potentes que el O_2 y la catálisis por óxidos metálicos.

1.3.1. Escalas de transporte en la atmósfera

Se denomina "transporte" al mecanismo por el cual los contaminantes atmosféricos se desplazan desde su foco emisor (localizaciones desde las que los contaminantes atmosféricos son emitidos) hasta un receptor (zonas o seres vivos que absorben los contaminantes del aire). Supongamos que, para una determinada masa de contaminante, tenemos un único foco emisor y un único receptor. El viento es el principal fenómeno atmosférico mediante el cual el contaminante se traslada o transporta hasta el receptor. Sin embargo, además de este

desplazamiento, la masa de contaminante (la que forma el denominado penacho de contaminación) crece a lo ancho y a lo alto, debido al proceso de mezcla que experimenta en la atmósfera turbulenta, denominado difusión turbulenta. Además, a lo largo de su camino se producirán cambios en la dirección y velocidad del viento que harán que la masa de contaminante serpente. La suma de estos procesos se denomina "dispersión", y es el mecanismo gracias al que la concentración de contaminantes en los receptores es menor que su concentración en los focos emisores. En determinadas condiciones atmosféricas, un penacho puede ser transportado a lo largo de cientos de kilómetros antes de impactar sobre receptores en el suelo; este proceso concreto se denomina transporte a larga distancia.

1.4. Problemas de contaminación en zonas urbanas

Existen dos tipos de problemas de contaminación atmosférica en las zonas urbanas: la emisión de contaminantes primarios (directamente emitidos por los focos emisores), y la formación de contaminantes secundarios (formados por reacción química de los contaminantes primarios). Los primeros pueden ser causados por focos individuales, generalmente pequeños y en gran número. Entre los problemas causados por contaminantes secundarios, se ha identificado la formación de O_3 por reacción fotoquímica de óxidos de nitrógeno y diversas especies de hidrocarburos.

A escala regional, podemos identificar tres tipos de problemas: el transporte de los contaminantes urbanos a escala regional, la emisión de contaminantes con velocidades de reacción lentas en la atmósfera, y que generan contaminantes secundarios a grandes distancias (SO_3), y la pérdida de visibilidad debida a las emisiones de determinados penachos de contaminantes con niveles de partículas significativos.

La escala global aborda, en general, problemas causados por la contaminación atmosférica a mediano y largo plazo, como el cambio climático, la reducción de la concentración de O_3 estratosférico, o las emisiones naturales procedentes de volcanes (que generan gran cantidad de partículas). Sin embargo, como excepción podemos mencionar el accidente de la Central Nuclear de Chernobyl, en el que se detectaron niveles anormalmente altos de radiactividad en el Noroeste del Océano Pacífico al poco tiempo del accidente, demostrando la existencia de un transporte a larga distancia de una emisión puntual.

1.5. Fenómenos implicados en el transporte de contaminantes atmosféricos

(Centro de súper computación de Galicia, 2004)

La descripción del transporte de un penacho de contaminantes en la atmósfera (figura 1.2) engloba fenómenos de muy diferente naturaleza. En primer lugar, el penacho se eleva sobre la altura de emisión debido a su velocidad de salida y, en el caso de penachos térmicos, a la mayor temperatura que posee el penacho respecto del ambiente. Esta elevación se prolonga en tanto sean perceptibles el impulso mecánico y, especialmente, el desplazamiento vertical por gradiente térmico: al resultado de este fenómeno no estacionario se le denomina sobre elevación del penacho. Otro fenómeno a considerar es el desplazamiento del centro del penacho debido al arrastre de los contaminantes por el viento: es la advección, que es el proceso de transporte de una propiedad atmosférica únicamente por el movimiento de la masa en la atmósfera. Simultáneamente a estos procesos, se produce el fenómeno de la difusión del contenido del penacho desde su línea central, en las tres direcciones del espacio (turbulenta). Al mismo tiempo, es preciso considerar para aquellos contaminantes no inertes, la cinética de las reacciones químicas que provocan su transformación en otros contaminantes secundarios; la velocidad con que el suelo absorbe a los contaminantes. Estos fenómenos, suelen considerarse de manera independiente del resto de los procesos. En la solución del problema de la difusión atmosférica el primer reto, es conocer donde se encuentran los contaminantes en cada momento para, posteriormente, estudiar cuales son las transformaciones que sufren durante el recorrido. Desde el punto de vista fenomenológico, el movimiento de un penacho está perfectamente caracterizado por el viento, la estabilidad y la turbulencia atmosférica.



Figura 1.2. Fenómenos presentes en el transporte de un penacho gaseoso en la atmósfera.

(Fuente: Centro de súper computación de Galicia)

1.6. Tipos de modelos de calidad del aire (Monroy, 2001, Finlayson-Pitts, 1986)

La modelación del comportamiento de la contaminación atmosférica es una herramienta fundamental en los estudios de polución del aire. Si bien existen modelos basados en experimentos de laboratorio que han permitido identificar algunos mecanismos del transporte de contaminantes atmosféricos, el problema global solo ha sido abordado por los modelos matemáticos, con mayor o menor dosis de empirismo; así, se distinguen dos tipos básicos de orientaciones en esta modelación:

1.6.1. Modelos determinísticos

Típicamente modelos de difusión atmosférica, que tratan de establecer alguna formulación matemática que describa los procesos atmosféricos que influyen en el transporte de contaminantes, como relación entre la causa (emisiones) y el efecto (niveles de concentración de contaminantes en la atmósfera y en el suelo).

1.6.2. Modelos probabilísticas, de correlación o estadísticos

Están basados en relaciones estadísticas entre datos de emisión, meteorología y concentraciones de contaminantes disponibles.

Se basan en la utilización de datos históricos de meteorología, emisión e inmisión para establecer, mediante técnicas estadísticas diversas, la inmisión probablemente alcanzable con unas condiciones meteorológicas y de emisión. Solo su aplicación como modelos de largo alcance o como modelos climatológicos está extendida, porque para alcanzar resultados válidos requieren un tiempo de cálculo prohibitivo para predicciones a corto plazo. Además, se requieren habitualmente grandes equipos de cómputo dedicados a esta tarea.

1.6.3. Modelos de dispersión o difusión

Los modelos de difusión atmosférica son una de las soluciones más extendidas al problema del comportamiento de los contaminantes en la atmósfera. Su planteamiento general sigue el esquema de un modelo de procesos o fenómenos, es decir, consisten en aplicar un modelo matemático a cada fenómeno que experimentan los contaminantes en la atmósfera, y sumar las contribuciones de todos los modelos de proceso en una ecuación de balance o conservación para cada propiedad considerada.

La aplicación de un modelo de difusión tiene como objeto la integración entre aquellos elementos que inciden en la calidad del aire, como son los condicionantes atmosféricos, localización de los focos e intensidad de los mismos, situación de los receptores, influencia de la topografía, orografía, etc., a fin de adecuar las medidas correctoras económicamente y técnicamente más viables.

En la mayoría de estos modelos las velocidades de cambio en las concentraciones c_i de los contaminantes químicos se describen por medio de la ecuación de difusión de la siguiente forma (Monroy, 2001):

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uc_i) + \frac{\partial}{\partial y}(vc_i) + \frac{\partial}{\partial z}(wc_i) = R_i + D_i + \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x \frac{\partial c_i}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y \frac{\partial c_i}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial c_i}{\partial z}\right)$$

Donde:

- c_i Es la concentración del contaminante químico i .
- u, v, w Son los componentes del vector velocidad del viento.
- K_x, K_y, K_z Son los coeficientes de difusión turbulenta.
- R_i Cambio de concentración de c_i debido a reacciones químicas.
- D_i Cambio de concentración de c_i debido a procesos físicos.

La resolución analítica de estas ecuaciones no es posible, puesto que no se conoce la forma de la función ni de la difusión turbulenta (D_i). Además, hay que tener en cuenta que es necesario resolver las N ecuaciones diferenciales simultáneamente, para tener en cuenta la influencia de la concentración de un contaminante en la velocidad de reacción R_i de los otros contaminantes y, por tanto, en su balance. Por ello, existen dos aproximaciones generales a la resolución de este problema: la vía euleriana y la vía lagrangiana. Y muchas soluciones particulares, especialmente para la vía lagrangiana.

La solución en estado estacionario de esta ecuación, en forma simplificada, se conoce como el modelo Gaussiano o de la columna (o pluma) de humo. Para fuentes puntuales, este modelo no toma en cuenta el término de las reacciones químicas R_i y únicamente es válido para contaminantes químicamente inertes (Lin y Hidelman, 1997).

La hipótesis de flujo estacionario considera, por tanto, que la ecuación de difusión es resuelta en cada período de tiempo en el que se considera que el flujo es estacionario, aunque puede

resolverse de forma consecutiva a lo largo de varios periodos estacionarios diferentes, de modo que se tenga en cuenta la variación del flujo sobre el transporte del contaminante de forma discreta; sin embargo, esta solución no permite que exista ninguna influencia del contaminante sobre el flujo.

1.6.3.1. Modelos Eulerianos y Lagrangianos

La forma en que se lleve a cabo la resolución de la ecuación de difusión puede ser bastante diferente, y así, clásicamente, se han planteado dos soluciones genéricas (figura 1.3.) al problema:

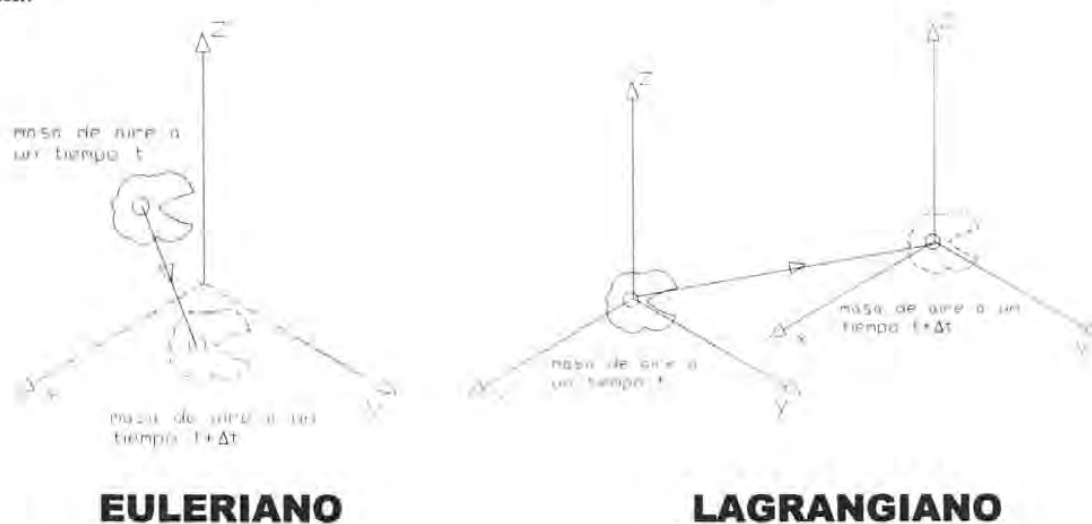


Figura 1.3. Solución euleriana y solución lagrangiana.

La solución euleriana según la cual se establece un sistema de referencia fijo (habitualmente, en el foco emisor), y se tratan de resolver las ecuaciones de balance de materia, energía y cantidad de movimiento, con diferentes grados de aproximación.

La solución lagrangiana, que utiliza dos sistemas de coordenadas, uno fijo (el foco emisor) para el movimiento general de los contaminantes (advección) y otro móvil, que se desplaza con el penacho, para la descripción de la difusión turbulenta en el seno del penacho.

Ambas soluciones son alternativas válidas al mismo problema y, además, se ha demostrado que aplicando las mismas aproximaciones en las dos vías con el fin de obtener una solución analítica, el resultado es el mismo.

- **Modelos Eulerianos o de Celdas Múltiples** (Monroy, 2001).

En este modelo, el espacio de aire que se encuentra sobre una ciudad o región se divide en celdas múltiples y se emplea un sistema cartesiano de referencia.

Las ecuaciones cinéticas de difusión que describen la variación de la concentración de los contaminantes a partir de condiciones iniciales se resuelven simultáneamente para cada una de estas celdas considerando la conservación de la masa.

El intercambio de masa entre las celdas está determinado por la advección, el campo de vientos y los procesos de difusión turbulenta.

Meteorológicamente, son variables muy interesantes como la temperatura, la humedad, el tipo de contaminantes, etc.

La advección depende de dos factores.

1. La fuerza del viento,
2. El ángulo del viento relativo a las líneas de igual valor a las líneas de la variable que esta siendo advectada.

La advección más fuerte ocurre cuando los vientos son orientados perpendicularmente a las isolíneas o líneas que se encuentran a un mismo nivel en concentraciones de contaminantes. No ocurre advección si las líneas de dirección del viento son paralelas a las isolíneas.

El tamaño mínimo de las celdas está limitado por la base de datos y por los recursos computacionales disponibles. En la práctica, para las zonas urbanas se emplea un tamaño de celda entre uno y cinco km por lado. Los modelos más complejos incorporan las características topográficas de la región a modelar.

Con este modelo se consigue conocer la evolución temporal de los contaminantes dentro de cada una de las celdas.

La concentración de los contaminantes cambia en función del tiempo, ya sea por la incorporación de nuevos contaminantes, por el transporte de contaminantes entre una celda y otra, por la difusión o por las reacciones químicas.

Este tipo de modelos presentan algunas desventajas en su aplicación; la primera es que se necesita una base de datos lo más completa posible; la segunda es que se requiere una buena capacidad de cómputo, debido a la cantidad de ecuaciones y a la complejidad inherente de los modelos. Estos modelos representan el único medio para la predicción de la distribución tridimensional de los contaminantes.

Una revisión importante de la aplicación del modelo Euleriano en la simulación del transporte y de la cinética química de los contaminantes fue realizada por Peters *et al.* (1995).

Estos modelos han sido ampliamente utilizados en el estudio de la dispersión de los oxidantes fotoquímicos Keubler *et al.* (1996), Hanna (1973), Lu y Turco (1996).

- **Modelos de Lagrange**

Los modelos de trayectoria describen el transporte de los contaminantes a través de un sistema de coordenadas en movimiento o sistema Lagrangiano. Con estos modelos se analiza la variación temporal de los contaminantes contenidos en una columna hipotética de aire de dimensiones específicas.

La columna de aire se mueve a lo largo de una trayectoria a través de un área de interés. La ecuación de conservación de masa debe resolverse dentro de la columna tomando en cuenta el número de fuentes y sumideros, las reacciones químicas y el transporte por difusión turbulenta vertical, mientras que el transporte horizontal debido al campo de vientos se elimina por definición (Eschenroeder y Martínez, 1972; Wayne *et al.*, 1973). Esto último, es una de las principales desventajas de los modelos de trayectoria, ya que no producen distribuciones horizontales de las concentraciones de los contaminantes

Tilden y Seinfeld (1982), investigaron la sensibilidad de un modelo fotoquímico de trayectoria para el ozono. Encontraron que las proporciones de O_3 , NO_3 y VOCs en la mezcla, tienen muy poca dependencia de los coeficientes de difusión vertical de las velocidades de deposición y de la humedad relativa.

- **Modelo Gaussiano.**

La ecuación de difusión Gaussiana relaciona los niveles de inmisión en un punto con la cantidad de contaminantes vertidos a la atmósfera desde el foco emisor, teniendo en cuenta las

condiciones de emisión de los gases y las características climáticas y topográficas del medio receptor.

El modelo calcula los niveles de inmisión en un punto de coordenadas $X(x, y, z)$, donde el origen del sistema de coordenadas se fija en la base de la chimenea, mediante la siguiente expresión:

$$X = \frac{QKV D}{2 \Pi u_s \sigma_y \sigma_z} \exp \left[-0.5 \left(\frac{y}{\sigma_y} \right)^2 \right]$$

Donde:

Q = Caudal de contaminante emitido (masa por unidad de tiempo)

K = Coeficiente de escala para convertir las concentraciones calculadas a las unidades deseadas

V = alcance vertical

D = Periodo de degradación

U_s = Velocidad media del viento (m / s) en la altura de emisión

σ_y, σ_z = Desviación estándar de la distribución de concentración lateral y vertical (Parámetros de dispersión).

Y = Coordenada transversal a la dirección horizontal del viento.

Se hace necesario indicar que el término que define el alcance vertical, incluye los efectos de la elevación de la fuente, la elevación del receptor, elevación del penacho, mezclas limitadas en la vertical, efectos gravitacionales y la deposición seca de partículas (con diámetros mayores de 0.1 micrómetros).

1.7. Transformación fotoquímica de contaminantes atmosféricos en la formación del ozono

A la hora de seleccionar un modelo de transformación química de contaminantes resulta necesario comprender las diferentes reacciones que pueden tener lugar en la atmósfera, para una correcta aplicación del mismo, y especialmente, si se pretende introducir alguna modificación o nuevo desarrollo en el mismo. Así, en la atmósfera, podemos distinguir dos tipos generales de reacciones:

Reacciones en fase gas: especialmente, las reacciones fotoquímicas, que son reacciones homogéneas.

Reacciones en fase acuosa: que pueden ser consideradas reacciones homogéneas en la fase acuosa si se obvia la etapa de la absorción de la especie química por el agua, como etapa no controlante.

1.7.1. Reacciones en fase gas

Las reacciones fotoquímicas, provocadas por la radiación solar, son importantes esencialmente debido a los productos que generan, especies químicas susceptibles de participar en otras reacciones con los contaminantes primarios (SO_2 , NO , NO_2 , CO , VOCs). Especialmente, el NO_2 absorbe fácilmente parte de la radiación solar.

1.7.2. Reacciones en fase acuosa

Como en el caso de las reacciones en fase gas, en la atmósfera estas reacciones son oxidantes fundamentalmente. Aunque pueden plantearse como reacciones heterogéneas (gas - líquido), en la práctica son reacciones homogéneas, en su mayoría, como reacciones en disolución acuosa.

Si las reacciones en fase gas de los óxidos de N son muy significativas, las reacciones en fase acuosa más importantes son las relativas a la transformación del SO_2 (g), que puede reaccionar rápidamente y oxidarse en la atmósfera hasta H_2SO_4 mediante la presencia de radicales OH u otros. También, y de forma importante, puede ser absorbido por gotas de agua, formándose H_2SO_4 en el seno de la gota.

En general, a la hora de abordar las reacciones en fase acuosa es preciso tener en cuenta la absorción del gas y su posterior transformación en el seno de la gota: equilibrio de absorción y equilibrio químico.

Además del SO_2 , otras especies presentan también gran actividad en fase acuosa: NH_3 y NO_x son las más importantes. Los compuestos orgánicos no presentan actividad, debido a su baja absorción.

Estos modelos cinéticos, especialmente los que refieren a las reacciones en fase gas con base fotoquímica, pueden ser incorporados a un modelo de difusión atmosférica que no tenga en

cuenta la reacción química, a fin de evaluar la importancia de la transformación química para cada especie considerada, y la posibilidad de que estas nuevas consideraciones puedan mejorar los resultados del modelo.

1.7.3. Análisis de mecanismos de reacciones fotoquímicas en la atmósfera, para la formación del smog fotoquímico u ozono.

El término general de oxidante o smog fotoquímico se refiere a la mezcla de reactivos y productos de la reacción existente cuando compuestos orgánicos volátiles (VOC's) y óxidos de nitrógeno (NO) están presentes simultáneamente en una atmósfera urbana en presencia de luz solar (Hanna, 1973).

Los productos de reacción más importantes como contaminantes secundarios son, el ozono, el nitrato de peroxiacetilo (PAN), aldehídos y cetonas, así como varios gases asociados a ácidos orgánicos e inorgánicos. De estos, el ozono es el compuesto más abundante en la atmósfera urbana, (Quadri y Sánchez, 1994).

Este tipo de contaminación atmosférica hizo su aparición con el uso extenso de las gasolinas como combustible de los automóviles. A este tipo de contaminación del aire tradicionalmente se le ha llamado smog. El término smog fotoquímico fue el resultado del descubrimiento de Haagen -Smit en 1952, acerca de la importancia que la fotólisis del dióxido de nitrógeno (NO₂) tiene en la transformación de los contaminantes primarios en secundarios en este tipo de contaminación.

Los contaminantes primarios involucrados activamente en la formación de los oxidantes fotoquímicos, vía las reacciones inducidas por la luz solar en la atmósfera, se conocen como precursores. Los precursores más importantes son el NO, el NO₂, y varios hidrocarburos, los cuales sufren reacciones con radicales OH, átomos de oxígeno y ozono, (Quadri y Sánchez, 1994).

El óxido nítrico (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO₂) suelen considerarse en conjunto con la denominación de NO_x. Son contaminantes primarios de mucha trascendencia en los problemas de contaminación.

El emitido en mayor cantidad es el NO, pero sufre una rápida oxidación a NO₂, siendo este el que predomina en la atmósfera. NO₂ tiene una vida corta y se oxida rápidamente a NO₃ en

forma de aerosol o a HNO_3 (ácido nítrico). Tiene una gran trascendencia en la formación del smog fotoquímico, del nitrato de peroxiacetilo (PAN) e influye en las reacciones de formación y destrucción del ozono, tanto troposférico como estratosférico, así como en el fenómeno de la lluvia ácida (Quadri y Sánchez, 1994).

Existen varios modelos de reacciones químicas que explican la formación de ozono en la atmósfera, Sin embargo, algunos no explican cuantitativamente el grado de ozono en la atmósfera.

Existen diferentes modelos para la formación de smog fotoquímico (Monroy, 2001):

- Ciclo fotoquímico básico del NO_2 , NO y O_3 .
- Sistema de óxidos de nitrógeno - aire seco
- Sistema de óxidos de nitrógeno- agua-monóxido de carbono.
- Mecanismo de reacción generalizado de Seinfeld (1986).

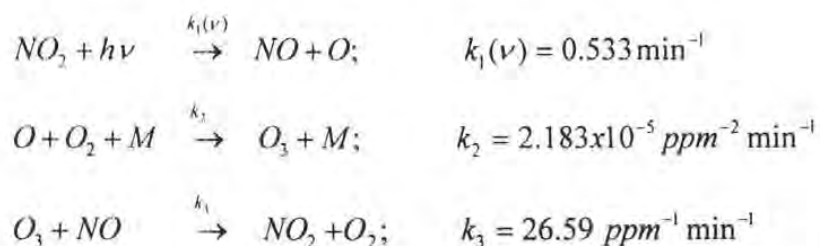
Estos modelos parten del hecho de que el NO emitido en la atmósfera, reacciona con el oxígeno atmosférico formando el NO_2 , y a su vez, el NO_2 formado reacciona con la luz solar y se disocia en NO y oxígeno atómico. El oxígeno atómico formado reacciona con el oxígeno molecular del aire para formar ozono.

Seinfeld, en 1988, estudiando las reacciones de los diferentes modelos a fin de explicar las concentraciones de ozono observadas, llegó a la conclusión de que el modelo de óxidos de nitrógeno-aire seco y el ciclo fotoquímico básico no logran explicar las concentraciones reales monitoreadas de ozono, debido a que existe consumo de ozono para la oxidación del NO . Asimismo, el modelo de óxidos de nitrógeno-agua-monóxidos de carbono, no logra explicar las concentraciones de monóxido de carbono presentes, además las concentraciones de NO_2 y ozono no son suficientes para explicar los niveles reales alcanzados en una atmósfera contaminada. Sin embargo, Seinfeld observó un proceso mediante el cual el NO se oxida en NO_2 , sin la participación del ozono como oxidante y sí mediante el uso de radicales libres como oxidantes. Estos radicales se formaron en la reacción de agua con el NO y con pequeñas cantidades de NO_2 .

1.7.3.1. Mecanismo de reacción generalizado de Seinfeld, para la formación del smog fotoquímico.

Este modelo de reacciones químicas propuesto por Seinfeld (1986), incorpora en sus reacciones químicas a los compuestos orgánicos volátiles (VOCs). El término COVs ó VOCs engloba a todos los compuestos orgánicos volátiles capaces de producir oxidantes fotoquímicos mediante reacciones provocadas por la luz solar en presencia de óxidos de nitrógeno.

Para este mecanismo, los niveles de ozono detectados en áreas contaminadas se deben a mecanismos de reacción complicados entre los óxidos de nitrógeno y los compuestos orgánicos volátiles en presencia de luz solar:



Las constantes de velocidad (k_1, k_2, \dots, k_{11}) de las reacciones fotoquímicas de disociación, dependen de la intensidad de la luz (Seinfeld, 1977)

Se denominan compuestos orgánicos volátiles a los hidrocarburos, alcanos, alquenos y alquinos, de bajo peso molecular, asimismo, formarán parte de este grupo los aldehídos, cetonas y ácidos, productos de la oxidación de los hidrocarburos. Por lo general, se dice que la gasolina es un hidrocarburo porque en su mayor parte contiene átomos de hidrogeno y de carbono, pero también contiene átomos de oxígeno, nitrógeno y azufre, (Quadri y Sánchez; 1994).

Las reacciones de los VOCs que nos interesan son las reacciones de oxidación, ya que es en ellas donde se producirán los suficientes radicales libres que a su vez favorecerán la oxidación del NO y con esto la formación del smog fotoquímico.

El mecanismo de reacción generalizado para la formación del smog fotoquímico, propuesto por Seinfeld, (1986), se muestra en el cuadro 1.3. Las constantes de velocidad de las reacciones fotoquímicas dependen de la intensidad de luz.

Cuadro 1.3. Mecanismo de reacción generalizado de formación del smog, propuesto por Seinfeld, (1986)

| Reacción | Constante de velocidad | Constante de velocidad (298 K) |
|--|---|--|
| $NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O$ | 0.533 min^{-1} (supuesto) (Seinfeld) | 0.533 min^{-1} |
| $O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$ | $6.0 \times 10^{-34} (T/300)^{-2.3} \text{ cm}^6 \text{ molec}^{-2} \text{ s}^{-1}$ | $2.183 \times 10^{-3} \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $NO + O_3 \rightarrow NO_2 + O_2$ | $2.2 \times 10^{-12} \exp(-1430/T) \text{ cm}^3 \text{ molec}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | $26.59 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $RH + OH \rightarrow RO_2 + H_2O$ | $1.68 \times 10^{-11} \exp(-559/T) \text{ cm}^3 \text{ molec}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | $3.775 \times 10^3 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $RCHO + OH \rightarrow RC(O)O_2 + H_2O$ | $6.9 \times 10^{-12} \exp(250/T) \text{ cm}^3 \text{ molec}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | $2.341 \times 10^4 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $RCHO + h\nu \rightarrow RO_2 + HO_2 + CO$ | $1.91 \times 10^{-4} \text{ min}^{-1}$ (supuesto) (Seinfeld) | $1.91 \times 10^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $HO_2 + NO \rightarrow NO_2 + HO$ | $3.7 \times 10^{-12} \exp(240/T) \text{ cm}^3 \text{ molec}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | $1.214 \times 10^{-4} \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $RO_2 + NO \rightarrow NO_2 + RCHO + HO_2$ | $4.2 \times 10^{-12} \exp(180/T) \text{ cm}^3 \text{ molec}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | $1.127 \times 10^4 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $RC(O)O_2 + NO \rightarrow NO_2 + RO_2 + CO_2$ | $4.2 \times 10^{-12} \exp(180/T) \text{ cm}^3 \text{ molec}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | $1.127 \times 10^4 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $OH + NO_2 \rightarrow HNO_3$ | $1.1 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molec}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | $1.613 \times 10^4 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $RC(O)O_2 + NO_2 \rightarrow RC(O)O_2NO_2$ | $4.7 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ molec}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | $6.893 \times 10^3 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ |
| $RC(C)ONO_2 \rightarrow RC(O)O_2 + NO_2$ | $1.95 \times 10^{-16} \exp(-3548/T) \text{ s}^{-1}$ | $2.143 \times 10^2 \text{ min}^{-1}$ |

Las ecuaciones diferenciales asociadas a los mecanismos de reacción para la formación del smog fotoquímico se presentan en el cuadro 1.4.

Cuadro 1.4. Ecuaciones diferenciales del mecanismo de reacción generalizado para la formación de smog fotoquímico (Seinfeld, 1977,1986)

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = k_1[\text{NO}_2] - k_3[\text{O}_3][\text{NO}] - k_7[\text{NO}][\text{HO}_2] - k_8[\text{NO}][\text{RO}_2] - k_9[\text{NO}][\text{RC(O)O}_2]$$

$$\frac{d[\text{NO}_2]}{dt} = -k_1[\text{NO}_2] + k_3[\text{O}_3][\text{NO}] + k_7[\text{NO}][\text{HO}_2] + k_8[\text{NO}][\text{RO}_2] + k_9[\text{NO}][\text{RC(O)O}_2] - k_{10}[\text{NO}_2][\text{OH}] - k_{11}[\text{NO}_2][\text{RC(O)O}_2] + k_{12}[\text{RC(O)O}_2\text{NO}_2]$$

$$\frac{d[\text{O}_3]}{dt} = k_2[\text{O}][\text{C}_2\text{O}_2][\text{C}_M] - k_3[\text{O}_3][\text{NO}]$$

$$\frac{d[\text{O}]}{dt} = k_1[\text{NO}_2] - k_2[\text{O}][\text{C}_2\text{O}_2][\text{C}_M]$$

$$\frac{d[\text{RH}]}{dt} = -k_4[\text{RH}][\text{OH}]$$

$$\frac{d[\text{OH}]}{dt} = -k_4[\text{RH}][\text{OH}] - k_5[\text{OH}][\text{RCHO}] + k_7[\text{NO}][\text{HO}_2] - k_{10}[\text{NO}_2][\text{OH}]$$

$$\frac{d[\text{RO}_2]}{dt} = k_4[\text{RH}][\text{OH}] + k_6[\text{RCHO}] - k_8[\text{NO}][\text{RO}_2] + k_9[\text{NO}][\text{RC(O)O}_2]$$

$$\frac{d[\text{RCHO}]}{dt} = -k_5[\text{OH}][\text{RCHO}] - k_6[\text{RCHO}] + k_8[\text{NO}][\text{RO}_2]$$

$$\frac{d[\text{RC(O)O}_2]}{dt} = k_5[\text{OH}][\text{RCHO}] - k_9[\text{NO}][\text{RC(O)O}_2] - k_{11}[\text{NO}_2][\text{RC(O)O}_2] + k_{12}[\text{RC(O)O}_2]$$

$$\frac{d[\text{HO}_2]}{dt} = k_6[\text{RCHO}] - k_7[\text{NO}][\text{HO}_2] + k_8[\text{NO}][\text{RO}_2]$$

$$\frac{d[\text{RC(O)O}_2\text{NO}_2]}{dt} = k_{11}[\text{NO}_2][\text{RC(O)O}_2] - k_{12}[\text{RC(O)O}_2\text{NO}_2]$$

C_M y C_{O_2} corresponden a las concentraciones de N_2 y O_2 en el aire, con valores de 79×10^4 y 21×10^4 ppm respectivamente.

Debemos hacer notar la interdependencia que existe entre los diversos contaminantes, el nitrógeno y el oxígeno, debido a que son los que, en mayor medida, se encuentran en la atmósfera, son parte fundamental de las reacciones para la formación del smog fotoquímico;

asimismo, la formación y concentraciones de ozono se ve claramente influenciada por estos componentes y las condiciones atmosféricas como la radiación solar, tal como se observa en las reacciones mostradas en el cuadro 1.3. De acuerdo a lo anterior podemos establecer que, debido a la interrelación y/o dependencia que existe entre los diversos elementos que dan origen a la contaminación, podemos establecer que al estudiar el comportamiento dinámico de uno de estos, estaremos en la posibilidad de conocer el comportamiento de los otros elementos de esta interrelación; esto de acuerdo al desarrollo de la teoría de los sistemas dinámicos no lineales que establece que dado un sistema determinista de la forma de la ecuación que se muestra abajo, no necesitamos observar el vector de estado X completo, y que las observaciones, libres de ruido, de uno de sus componentes pudiera ser suficiente para reconstruir el sistema dinámico completo.

$$x_{t+1} = F(x_t; \mu)$$

Donde x_t es un vector cuyos componentes especifican totalmente el estado del sistema en el tiempo t , μ es un vector de los valores del parámetro que se obtienen en el mundo real, y F es una función en el estado en el tiempo $t+1$.

En el siguiente capítulo haremos una introducción a la problemática de la contaminación en la Zona Metropolitana del Valle de México.

CAPITULO II

2.1. MEDICIÓN DE LOS ÍNDICES DE CONTAMINACIÓN

La cuenca atmosférica de la zona metropolitana del valle de México (ZMVM), presenta características que la hacen susceptible a la contaminación; rodeada de montañas, vientos moderados casi todo el año, frecuentes inversiones térmicas, alta radiación solar en época seca, altas emisiones debido al parque vehicular, así como a la gran cantidad de industria de transformación establecidas en la zona (Jáuregui, 1971).

2.1.1. El índice IMECA

La contaminación atmosférica fotoquímica en la ZMVM, representada principalmente por el ozono y las partículas suspendidas menores a 10 micrómetros de diámetro, constituye un gran problema que afecta la salud de sus habitantes.

A fines de 1977 la Dirección General de Saneamiento Atmosférico de la Subsecretaría de Mejoramiento del Ambiente de la Secretaría de Salubridad y Asistencia, desarrolló el Índice Mexicano de la Calidad del Aire "IMEXCA", con la finalidad de informar al público de manera precisa y oportuna.

El IMEXCA se publicó a partir del 6 de diciembre de 1977, debido a que en México no existían normas oficiales de calidad del aire la estructura técnica se basó en el Pollutant Standard Index (PSI, por sus siglas en inglés) utilizado en Estados Unidos, desarrollando funciones lineales segmentadas donde los puntos de quiebre correspondían a las normas primarias de calidad del aire del mencionado país.

Actualmente este índice se denomina como Índice Metropolitano de la Calidad del Aire "IMECA" y se genera para los contaminantes criterio¹ como O₃, NO₂, SO₂, CO y PM₁₀. Se define como un valor representativo de los niveles de contaminación atmosférica y sus efectos en la salud, dentro de una región determinada. Es un valor de referencia.

¹ Se denominan contaminantes criterio del aire a aquellas sustancias presentes en el aire ambiente que son abundantes, se encuentran en todas partes y para los cuales se han establecido concentraciones máximas permisibles (normas para protección de la salud) arriba de los cuales se tienen efectos nocivos a la salud reconocidos. Los contaminantes criterio actuales son el ozono, el bióxido de azufre, el monóxido de carbono, el bióxido de nitrógeno, las partículas suspendidas totales, las partículas menores a 10 micrómetros y el plomo en filtros de partículas.

2.2. El sistema de monitoreo atmosférico (SIMAT)

<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnrama2.htm>

Actualmente el Sistema de Monitoreo Atmosférico (SIMAT), tiene como objetivo, Vigilar y evaluar la calidad del aire en la ZMVM. Está integrado por cuatro subsistemas operativos especializados, una unidad de apoyo móvil para trabajos en campo y un Laboratorio de Transferencia de Estándares de Calibración. Los subsistemas son

- REDMA - Red Manual de Monitoreo Atmosférico
- REDDA - Red de Depósito Atmosférico
- REDMET - Red Meteorológica
- RAMA - Red Automática de Monitoreo Atmosférico

2.2.1. Red Manual de Monitoreo Atmosférico (REDMA)

<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnredma2.htm>

REDMA, es la Red Manual de Monitoreo Atmosférico del SIMAT y su principal objetivo es el monitoreo de partículas suspendidas en el aire y la determinación de la concentración de algunos elementos y componentes contenidos en éstas.

Cuenta con 14 estaciones ubicadas en diversos puntos de la ZMVM, 9 de las cuales se localizan en el Distrito Federal y 5 en el Estado de México. Las estaciones de monitoreo cuentan con criterios técnicos para su ubicación, densidad de población, distribución de fuentes de emisión y topografía.

Los equipos de medición con los que cuenta la REDMA (Cuadro 2.1) efectúan un muestreo semiautomático para medir partículas suspendidas totales (PST), partículas menores a 10 micrómetros (PM₁₀) y partículas menores a 2.5 micrómetros (PM_{2.5}), cada uno opera con base en el diámetro aerodinámico distintivo de cada partícula.

Cuadro 2.1. Equipos de medición de la REDMA

| EQUIPO DE MONITOREO - REDMA | |
|---|--|
| Contaminante | Principio de operación |
| Partículas Suspendidas Totales (PST) | Muestreador de Alto Volumen |
| Partículas Menores a 10 micrómetros (PM ₁₀) | Muestreador de Alto Volumen con cabezal de separación. |
| Partículas Menores a 2.5 micrómetros (PM _{2.5}) | Muestreador de Bajo Volumen |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnredma2.htm>)

Las muestras de PST y PM₁₀ son colectadas sobre un filtro para la obtención del peso del depósito que se efectúa por el método gravimétrico (pesado) y en su análisis químico se determinan componentes metálicos, sulfatos y nitratos (Cuadro 2.2). La medición se realiza cada 6 días para evitar el sesgo estadístico que presenta el muestreo cotidiano.

Cuadro 2.2. Métodos de análisis aplicados

| Método de obtención por parámetro | |
|--|--------------------|
| Contaminante | Método de Análisis |
| Partículas Suspendidas Totales (PST) | Gravimétrico |
| Partículas Menores a 10 micrómetros (PM ₁₀) | Gravimétrico |
| Partículas Menores a 2.5 micrómetros (PM _{2.5}) | Gravimétrico |
| Sulfatos (SO ₂) | Química húmeda |
| Nitratos (NO ₃) | Química húmeda |
| Metales pesados: Plomo (Pb); Cadmio (Cd); Cobre (Cu); Hierro (Fe); Vanadio (V); Manganeso (Mn); y Níquel (Ni). | Absorción Atómica |
| Los análisis se realizan en el Laboratorio de Análisis Ambiental de la Facultad de Química de la UNAM. | |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnredma2.htm>)

2.2.2. Red de Depósito Atmosférico (REDDA)

<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnredda2.htm>

La REDDA es el subsistema del SIMAT a través del cual se obtienen muestras de depósito húmedo como material contaminante que desciende con el agua de lluvia (lluvia ácida) y depósito seco como material que se precipita en época seca al suelo. Su análisis permite conocer el flujo de sustancias tóxicas de la atmósfera a la superficie terrestre y su intervención en la alteración de los elementos típicos del suelo y propiedades químicas del agua de lluvia.

Cuadro 2.3. Parámetros y técnicas de análisis en depósito húmedo

| Parámetro | | Técnica de Análisis |
|-------------------------|--|---|
| Volumen | | Volumétrica |
| pH | | Electrométrico |
| Conductancia específica | | Conductímetro digital |
| Acidez | | Titulación |
| Alcalinidad | | Titulación |
| Aniones | Sulfatos | Cromatografía de líquidos |
| | Nitratos | |
| | Cloruros | |
| Cationes | Amonio | Electrodo selectivo de amoniaco |
| | Sodio (Na), Potasio (K), Calcio (Ca), Magnesio (Mn) | Espectrofotometría de Absorción Atómica de Flama |
| Metales pesados | Cadmio (Cd), Cobre (Cu), Hierro (Fe), Plomo (Pb), Zinc (Zn). | Espectrofotometría de Absorción Atómica con horno de grafito acoplado |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnredda2.htm>)

La REDDA cuenta actualmente con 16 estaciones de monitoreo en la ZMVM, de las cuales 12 se ubican en el Distrito Federal y 4 en el Estado de México. Las estaciones de monitoreo cuentan con criterios técnicos para su ubicación, densidad de población, distribución de fuentes de emisión y topografía.

Las estaciones de monitoreo cuentan con colectores automáticos para depósito atmosférico que captan por separado muestras de depósito húmedo (lluvia, granizo, niebla, llovizna) (Cuadro 2.3) y depósito seco (polvos, partículas) (Cuadro 2.4.), las cuales se analizan en el laboratorio. Cada estación cuenta con un pluviógrafo que mide con exactitud el volumen de precipitación pluvial, lo que ayuda a determinar con mayor precisión la concentración de parámetros específicos.

En el depósito húmedo (o lluvia ácida), se obtienen registros de los siguientes parámetros: pH, conductividad, aniones (nitratos, sulfatos y cloruros) y cationes (amonio, calcio, magnesio, sodio y potasio). Con estas mediciones es posible determinar la acidez y el balance iónico del agua de lluvia. En el depósito seco, se obtiene información de los metales: aluminio, zinc, manganeso, arsénico, cobre, cadmio, mercurio, hierro, plomo y estroncio.

Cuadro 2.4. Parámetros y técnicas de análisis en depósito seco

| Parámetros | | Técnica de análisis |
|--|---|---------------------------------------|
| Elementos | Bario (Ba), Potasio (K), Calcio (Ca), Hierro (Fe), Manganeso (Mn), Plomo (Pb), Selenio (Se), Titanio (Ti), Zinc (Zn). | Barrido por fluorescencia de rayos X* |
| *Se han detectado otros elementos pero con menor frecuencia. Los análisis se realizan en el Laboratorio de Análisis Ambiental de la Facultad de Química de la UNAM. | | |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnredda2.htm>)

2.2.3. Red Meteorológica (REDMET)

(<http://www.sma.df.gob.mx/simat/mide>)

La REDMET es el subsistema del SIMAT que tiene como función principal proporcionar información de los parámetros meteorológicos para elaborar el pronóstico meteorológico y modelos de dispersión, cuyo fin es analizar el desplazamiento de los contaminantes a través del tiempo.

Estaciones de monitoreo de REDMET

La REDMET cuenta actualmente con 15 estaciones de monitoreo ubicadas estratégicamente en la ZMVM, 9 de las cuales están localizadas en el Distrito Federal y 6 en el Estado de México. Los equipos de medición son sensores automáticos de temperatura ambiente (TMP), velocidad de viento (WSP), dirección del viento (WDR), humedad relativa (RH) y radiómetros para radiación solar ultravioleta tipo-B (UV-B), que envían sus registros de manera automática, minuto a minuto los 365 días del año. Cuenta también con un perfilador acústico (SODAR) que mide los perfiles del viento en la horizontal y la vertical (velocidad y dirección) de la tropósfera baja y un perfil de temperatura en la vertical (Cuadro 2.5).

Cuadro 2.5. Equipo y parámetros de medición de la REDMET

| EQUIPO DE MONITOREO | |
|---|-------------------------------|
| Parámetro | Principio de operación |
| Velocidad de Viento (WSP) | Anemómetro convencional |
| Dirección de Vientos (WDR) | Veleta convencional |
| Temperatura (TMP) | Termistor |
| Humedad Relativa (RH) | Sensor tipo capacitor |
| Perfil de Viento (velocidad y dirección) y perfil de temperatura (vertical) | SODAR |
| Radiación Solar UV-B | Radiómetro |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnredda2.htm>)

10 de las estaciones de la REDMET utilizan sensores de tipo electromecánico (WSP y WDR) y sensores de aluminio (TMP), el resto de las estaciones emplean sensores ultrasónicos (WSP y WDR) y sensores tipo termistor (TMP) y capacitivo (RH). A partir de 1997, comenzaron a reemplazar los equipos convencionales de depósito total por equipos semiautomáticos de depósito (húmedo y seco).

2.2.4. Red Automática de Monitoreo Atmosférico (RAMA)

(<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnrama2.htm>)

La RAMA es el subsistema del SIMAT que realiza mediciones continuas y permanentes de ozono (O₃), dióxido de azufre (SO₂), óxidos de nitrógeno (NO_x), monóxido de carbono (CO), partículas menores a 10 micrómetros (PM₁₀), partículas menores a 2.5 micrómetros (PM_{2.5}) y ácido sulfhídrico (H₂S) en situaciones de riesgo para la salud de la población.

Estaciones de monitoreo de RAMA

Cuenta con 36 estaciones de monitoreo ubicadas en puntos estratégicos de la ZMVM, 24 están localizadas en el Distrito Federal y 12 en el Estado de México. Las estaciones de monitoreo cuentan con criterios técnicos para su ubicación, densidad de población, distribución de fuentes de emisión y topografía (Anexo 1).

Los equipos de medición con los que cuenta la RAMA son analizadores para gases específicos, cada uno opera en base a las propiedades fisicoquímicas que identifican a cada contaminante (Cuadro 2.6.)

Cuadro 2.6. Métodos aplicados en la detección de contaminantes en la RAMA

| Contaminante | Principio de operación |
|--|--|
| Ozono (O ₃) | Fotometría en el rango de ultravioleta |
| Óxidos de nitrógeno (NO, NO ₂ , NO _x) | Quimiluminiscencia |
| Dióxido de azufre (SO ₂) | Fluorescencia pulsante |
| Monóxido de carbono (CO) | Espectroscopia no dispersiva por correlación de filtro gaseoso |
| Partículas menores a 10 micrómetros (PM ₁₀) | Atenuación de radiación beta y Balanza de Oscilación |
| Partículas menores a 2.5 micrómetros (PM _{2.5}) | Atenuación de radiación beta y Balanza de Oscilación |
| Ácido sulfhídrico (H ₂ S) | Ionización de Flama |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnrama2.htm>)

Estos equipos realizan mediciones minuto a minuto las 24 horas de los 365 días del año. La información de las estaciones de monitoreo se transmite a un sistema central donde se procesa y valida para generar promedios de una hora. Esta información se almacena para integrar las bases de datos públicas.

2.2.5 Algoritmos para el cálculo del IMECA

Dependiendo del contaminante, en la ZMVM se instrumentan dos algoritmos para el cálculo del IMECA, el primero para la obtención de los subíndices correspondientes a diferentes indicadores de la calidad del aire dado para O₃, NO₂, SO₂, CO es el algoritmo simplificado y el segundo para PM₁₀ toma la estructura del Pollutant Standard Index (PSI, por sus siglas en inglés).

La diferencia fundamental es que el PSI define más de un punto de quiebre mientras que el método simplificado actual utiliza solo uno, que es el valor de la norma oficial mexicana para cada contaminante. El algoritmo simplificado se utiliza desde el 23 de diciembre de 1994 en la ZMVM. El cuadro 2.7 muestra los parámetros y las unidades en que se registra cada uno de ellos.

Cuadro 2.7. Parámetros y unidades de medición registrados en el SIMA

| Símbolo | Parámetro | Unidades | Símbolo | Parámetro | Unidades |
|------------------|-------------------------------------|-------------------|---------|--|---------------|
| O ₃ | Ozono | ppm | A | Aniones (nitratos y sulfatos) | mg/l |
| SO ₂ | Bióxido de azufre | ppm | C | Cationes (amonio, calcio, magnesio, sodio y potasio) | mg/l |
| NO ₂ | Bióxido de nitrógeno | ppm | CE | Conductividad electrolítica | μS/cm |
| CO | Monóxido de carbono | ppm | MET | Parámetros meteorológicos | |
| PM ₁₀ | Partículas menores a 10 micrómetros | μg/m ³ | WSP | Velocidad del viento | m/s |
| PST | Partículas suspendidas totales | μg/m ³ | TMP | Temperatura | °C |
| Pb | Plomo | μg/m ³ | WDR | Dirección del viento | grados azimut |
| pH | Potencial hidrógeno | unidades pH | RH | Humedad relativa | % |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnrama2.htm>)

ppm: partes por millón

m/s : metros por segundo

%C : porcentaje

μg/m³: microgramos por metro cúbico

°C : grados centígrados

mg/l: miligramos por litro

μS/cm : microSiemes por centímetro

2.2.6. Unidades de medición

<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnimeca.htm>

Para determinar la concentración de una sustancia química en un volumen se utilizan las partes por millón (ppm). Las ppm se utilizan para determinar concentraciones muy pequeñas de gases en la atmósfera; en el caso de las partes por billón. Cada billonésima parte de este volumen, correspondiente a la sustancia de nuestro interés, se considera una parte por billón de la sustancia (CEPIS, 2003).

En el problema de la contaminación atmosférica es especialmente importante la utilización de unidades de concentración tanto para la emisión como para la inmisión de contaminantes. Hay que tener en cuenta que la mayoría de los contaminantes atmosféricos presentan efectos negativos sobre el medio en concentraciones muy pequeñas, y que el grado de dilución que experimenta un contaminante en la atmósfera desde su valor de emisión hasta el de inmisión, puede ser del orden de 1000, por eso se utilizan múltiplos de concentración a saber:

- Fracción volumétrica, como ppm (partes por millón)
- ppb (partes por mil millones).
- Otra parámetro utilizado es la densidad o concentración másica, como mg/m³N, μg/m³ (emisión); g/m³N, g/m³ (inmisión), donde N denota la normalización de la concentración a condiciones normales de presión y temperatura (25 °C y 1 atm).

La conversión entre ambos tipos de unidades es relativamente simple, aunque depende de la composición media del contaminante, más exacto de su peso molecular medio (PM):

$$1 \text{ ppm(vol)} = \frac{1 \text{ L de contaminante}}{10^6 \text{ L de aire}} = \frac{(1 \text{ L}/22.4) \times PM \times 10^6 \mu\text{g}/\text{m}^3}{10^6 \text{ L} \times 298 \text{ K}/273 \text{ K} \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{L}} = 40.9 \times PM \text{ g}/\text{m}^3 \text{ N}$$

Clasificación de la calidad del aire

A partir de los criterios mexicanos de la calidad del aire se establecieron dos puntos y niveles en donde ocurren daños significativos a la salud. Al primero se le asignó un valor de 100 y al segundo 500; entre estos dos puntos se definieron dos más, cuyo objetivo es clasificar el intervalo en diferentes términos descriptivos de la calidad del aire (Cuadro 2.8.).

Cuadro 2.8. Clasificación de la calidad del aire

| IMECA | CALIDAD DEL AIRE | EFFECTOS |
|---------|------------------|---|
| 0-100 | Satisfactoria | Situación favorable para la realización de todo tipo de actividades |
| 101-200 | No Satisfactoria | Aumento de molestias menores en personas sensibles |
| 201-300 | Mala | Aumento de molestias e intolerancia relativa al ejercicio en personas con padecimientos respiratorios |
| 301-500 | Muy mala | Aparición de diversos síntomas e intolerancia al ejercicio en la población |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnimeca.htm>)

Cuadro 2.9. Intervalos que marca la Norma Oficial Mexicana para los contaminantes

| CONTAMINANTE | INTERVALO | ECUACIÓN | ALGORITMO |
|------------------|------------------------------|---|--------------|
| O ₃ | 0.0 - 0.11 ppm | $I_{O_3} = 909.090909 * C_{O_3}$ | SIMPLIFICADO |
| | 0.11 - 0.60 ppm | $I_{O_3} = 816.326630 * C_{O_3} + 10.20409$ | |
| NO ₂ | 0.0 - 0.21 ppm | $I_{NO_2} = 476.190476 * C_{NO_2}$ | SIMPLIFICADO |
| | 0.21 - 2.00 ppm | $I_{NO_2} = 223.463687 * C_{NO_2} + 53.07264$ | |
| SO ₂ | 0.0 - 0.13 ppm | $I_{SO_2} = 769.230769 * C_{SO_2}$ | SIMPLIFICADO |
| | 0.13 - 1.00 ppm | $I_{SO_2} = 459.770114 * C_{SO_2} + 40.22989$ | |
| CO | 0.0 - 11.0 ppm | $I_{CO} = 9.090909 * C_{CO}$ | SIMPLIFICADO |
| | 11.0 - 50.0 ppm | $I_{CO} = 10.256410 * C_{CO} - 12.820512$ | |
| PST | 0.00 - 260 µg/m ³ | $I_{PST} = 0.384615 * C_{PST}$ | SIMPLIFICADO |
| | 260 - 1000 µg/m ³ | $I_{PST} = 0.540540 * C_{PST} - 40.540541$ | |
| PM ₁₀ | 0.00 - 50 µg/m ³ | $I_{PM10} = C_{PM10}$ | TIPO PSI |
| | 51 - 350 µg/m ³ | $I_{PM10} = (1/2) * C_{PM10} + 25$ | |
| | 351 - 420 µg/m ³ | $I_{PM10} = (107) * C_{PM10} - 300$ | |
| | 421 - 500 µg/m ³ | $I_{PM10} = (108) * C_{PM10} - 225$ | |
| | 501 - 600 µg/m ³ | $I_{PM10} = C_{PM10} - 100$ | |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnimeca.htm>)

Los valores que aparecen en el 1^{er} intervalo que indica el cuadro 2.9, se refieren al límite que señala la Norma Oficial Mexicana (NOM) de cada contaminante. Estas normas están definidas como se muestra en el cuadro 2.10

Cuadro 2.10. Valores normados para los contaminantes

| CONTAMINANTE | Valores Limite | | |
|--|--|-----------------------------|---|
| | Exposición Aguda | | Exposición Crónica |
| | Concentración y tiempo promedio | Frecuencia máxima aceptable | Para protección de la salud de la población |
| Ozono (O ₃) | 0.11 ppm (1 hora) | 1 cada 3 años | ----- |
| Bióxido de Azufre (SO ₂) | 0.13 (24 horas) | 1 vez al año | 0.03 ppm (media aritmética anual) |
| Bióxido de Nitrógeno (NO ₂) | 0.21 ppm (1 hora) | 1 vez cada año | ----- |
| Monóxido de Carbono (CO) | 11 ppm (8 horas) | 1 vez cada año | ----- |
| Partículas Suspendidas Totales (PST) | 260 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (24 horas) | 1 vez cada año | 75 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (media aritmética anual) |
| Partículas Suspendidas Fracción Respirable (PM ₁₀) | 150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (24 horas) | 1 vez cada año | 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (media aritmética anual) |
| Plomo (Pb) | ----- | ----- | 1.5 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (media aritmética en 3 meses) |

(Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnimeca.htm>)

La Figura 2.1 muestra la función lineal del IMECA de ozono, el primer punto de quiebre corresponde al valor de la norma mexicana de calidad del aire de 0.11 ppm como promedio horario, homologado con un valor de 100 puntos. El segundo punto en 0.600 ppm corresponde a 500 puntos del IMECA.

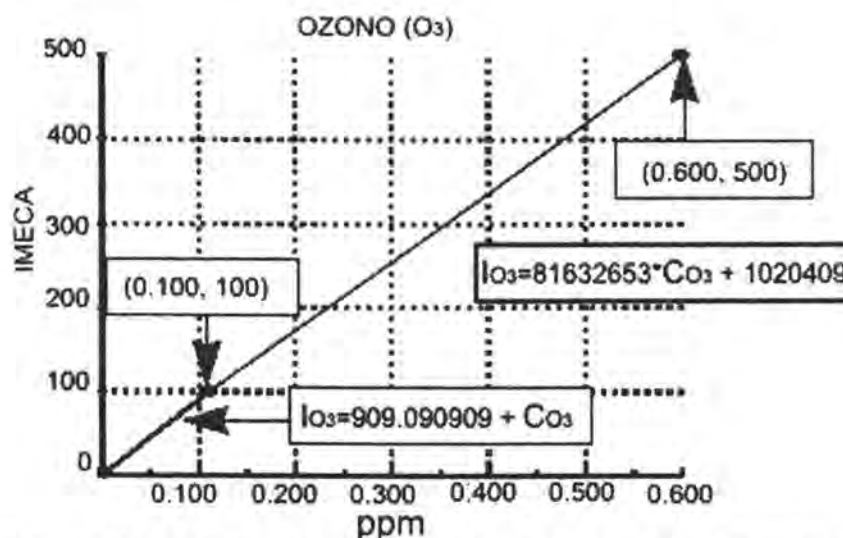


Figura 2.1. Función lineal del IMECA (Fuente: <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnimeca.htm>)

En el siguiente capítulo se describirá la metodología de análisis que se aplicó para encontrar el comportamiento dinámico de las series de tiempo de ozono.

Capítulo III

3.1 Metodología de análisis de sistemas dinámicos

3.1.1. Introducción a los sistemas dinámicos (Edwards, 2000)

La *dinámica* de cualquier situación se refiere a la forma en que dicha situación cambia en el curso del tiempo. Un *sistema dinámico* es un *ajuste físico* junto con las reglas para saber cómo cambia o se desarrolla a partir de un momento de tiempo al siguiente. Tradicionalmente, los sistemas dinámicos son sistemas que evolucionan en el tiempo.

Una meta básica de la teoría matemática de los sistemas dinámicos es determinar o caracterizar el comportamiento a largo plazo del sistema. Tres clases de sistemas dinámicos son comunes:

1. simbólicos
2. de tiempo discreto
3. de tiempo continuo

3.1.2. Sistemas dinámicos simbólicos

Aquí la configuración física es una cadena de símbolos formales, que se toman como las letras a , b , c . Las reglas para desarrollar una toma de la secuencia, la forma de reescribir subsecuencias o letras solas por el reemplazo de cadenas, se llaman *reglas de reescritura*.

Supongamos que hay exactamente dos símbolos a y b y dos reglas de reescritura:

$$a \rightarrow aa$$

Y

$$b \rightarrow ba$$

Comenzando en la generación 0 con la secuencia b . Por la segunda regla, la generación 1 es ba , y esa generación 2 es después $baaa$, por ejemplo:

| Generación | Secuencia |
|------------|----------------------|
| 0 | b |
| 1 | ba |
| 2 | $baaa$ |
| 3 | $baaaaaaa$ |
| 4 | $baaaaaaaaaaaaaaaaa$ |

Después de algunas generaciones tendremos la idea que la naturaleza a largo plazo de la secuencia es un solo b seguido por un conjunto de a 's a largo plazo.

3.1.3. Sistemas de tiempo discreto

Una configuración física se reduce a menudo a un conjunto de mediciones, por ejemplo, de temperatura, presión, índices de contaminación, etc. En sistemas discretos, damos estas medidas como una secuencia de tiempos específicos. Esperaríamos que dadas las mediciones al tiempo n se tenga una regla para determinar las medidas en el tiempo $n + 1$. Si x_n representa las medidas en el tiempo n , esta regla puede tomar la siguiente forma (ecuación 3.1):

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad (3.1)$$

Donde $f(x)$ es una función dada, fijada todo el tiempo. La evolución del sistema se obtiene *iterando* la siguiente función (ecuación 3.2):

$$x_n = \underbrace{f(f(\dots f(x_0)\dots))}_{n \text{ veces}} \quad (3.2)$$

Un ejemplo clásico estudiado en los años setentas es el de las funciones de la ecuación cuadrática $f(x) = c x (1 - x)$ donde c es un número real fijo. El gráfico de esta función es una parábola que pasa por el eje x en: $x = 0$, $x = 1$.

El valor máximo es $c / 4$ que ocurre en $x = 0.5$. Un ejemplo se muestra en la figura 3.1:

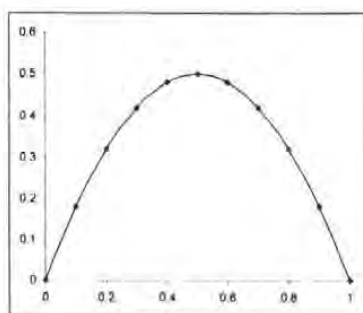


Figura 3.1 Gráfica de $y=2x(1-x)$

Si restringimos c para ser no negativa y menor o igual a 4, la función $f(x)$ tiene la característica que traza todos los puntos en el intervalo de unidad $[0, 1]$ para los valores en $[0, 1]$. Se denomina a tal mapeo un intervalo de auto-mapeo.

Los valores específicos de las medidas de la configuración física a menudo se llaman *el estado* del sistema dinámico. En nuestro ejemplo, *el espacio de estado* es el intervalo de la unidad. Si comenzamos con un estado inicial de $x_0 = 0.1$ y fijamos $c = 2$, es fácil computar los estados subsecuentes por medio de la ecuación $x_{n+1} = f(X_n)$

Los resultados se muestran en el cuadro 3.1.

Cuadro 3.1. Iteración de $f(x) = 2x(1-x)$ comenzando con $x_0 = 0.1$

| | |
|-------|--------------|
| x_0 | 0.1 |
| x_1 | 0.18 |
| x_2 | 0.2952 |
| x_3 | 0.41611392 |
| x_4 | 0.4859262512 |
| x_5 | 0.4996038592 |
| x_6 | 0.4999996862 |
| x_7 | 0.5000000000 |

Podemos deducir fácilmente el comportamiento a largo plazo de este sistema: el límite de x_n es 0.5 cuando $n \rightarrow \infty$. El punto $x = 0.5$ tiene una característica especial, satisface $f(0.5) = 0.5$, y califica así como *punto fijo de $f(x)$* , o *un punto de equilibrio* del sistema dinámico. Se puede demostrar que cualquier estado inicial dentro de $[0,1]$ conduce eventualmente a $x = 0.5$ en el límite. Así, $x = 0.5$ es un ejemplo de un *punto fijo estable o atractivo*.

3.1.4. Sistemas tiempo - Continuo

Muchos sistemas se modelan con el tiempo t , como una variable continua. Entonces, las mediciones del estado forman una función del tiempo $x(t)$. Las reglas de transformación no son descritas tan ampliamente en términos del movimiento de un instante t al siguiente; en su lugar se da una regla para el cambio *de $x(t)$* . Esto conduce a una ecuación diferencial, su forma más simple se presenta en la ecuación 3.3:

$$x'(t) = f(t, x) \quad (3.3)$$

Para una función dada f del tiempo y estado; junto con el estado inicial $x(0) = x_0$, se conoce como *problema del valor inicial*. En la actualidad, la teoría de los sistemas dinámicos incorpora en gran parte para su estudio la teoría de ecuaciones diferenciales, pero cabe enfatizar que los conceptos básicos de sistemas dinámicos tienen igual importancia en

cualquiera de las áreas mencionadas: dinámica simbólica, dinámica del tiempo discreto y problemas del valor inicial.

De lo anterior, podemos decir que un sistema dinámico consiste de dos componentes: Una regla o “dinámica” la cual especifica cómo un sistema se desarrolla, y una condición inicial o “estado” del cual el sistema parte.

La teoría de los sistemas dinámicos y la dinámica no lineal se desarrollaron fuera del estudio de las ecuaciones diferenciales, las cuales se iniciaron como un intento para la descripción de fenómenos naturales, para entender y predecir el movimiento que nos rodea: la órbita de los planetas, la vibración de una cuerda, la ondulación en la superficie de un lago, los patrones de desarrollo del tiempo, etc.

Un sistema dinámico consiste en un espacio fase abstracto o espacio de estados cuyas coordenadas describen el estado dinámico en cualquier instante; y una regla dinámica que especifica la tendencia futura inmediata de todas las variables de estado, dados los valores presentes de esas mismas variables de estado. Matemáticamente, un sistema dinámico es descrito por un problema de valor inicial.

3.2. Espacio Fase

El espacio fase es la colección de posibles estados de un sistema dinámico. Un espacio fase puede ser finito (ej. la tirada ideal de la moneda, se tienen dos estados: Águila y Sol), enumerable infinitamente (ej. las variables de estado son enteros), o innumerable (ej. las variables de estado son números reales). Queda implícito en la noción de que un estado particular en el espacio fase especifica al sistema completamente, que el estado es todo lo que se necesita saber sobre el sistema para tener conocimiento completo del futuro inmediato. Así, el espacio fase del plano pendular es bidimensional y consiste en la posición (ángulo) y velocidad. Según Newton, la especificación de estas dos variables determina singularmente el movimiento subsiguiente del péndulo.

Sin embargo, si tenemos un sistema no autónomo, donde el mapa o el campo vectorial depende explícitamente del tiempo (ej. modelo para crecimiento de la planta que depende del flujo de luz solar), entonces según la definición de espacio fase, se debe incluir el tiempo como una coordenada del espacio fase y se debe dar un tiempo específico para saber el movimiento subsiguiente.

El camino, en el espacio fase, trazado por una solución de un problema de valor inicial se llama una órbita o trayectoria del sistema dinámico. Si las variables de estado toman valores reales en un continuo, la órbita de un sistema del *tiempo - continuo* es una curva, mientras la órbita de un sistema del tiempo - discreto es una sucesión de puntos.

3.3. Mapeo

Un mapeo o aplicación simplemente es una función f , en el espacio fase que da el próximo estado, $f(z)$ (la imagen), del sistema dando su actual estado, z . (a menudo se encuentra la notación $z' = f(z)$, dando los primeros promedios del próximo punto, no la derivada). Una función debe tener un sólo valor por cada estado, pero podría haber varios estados diferentes que dan lugar a la misma imagen.

Los mapas que permiten cada estado en el espacio fase a ser accedido (hacia) y tienen una preimagen precisamente para cada estado (uno-a-uno) son invertibles. Si además el mapa y su inversa son continuos (con respecto a la coordenada de espacio fase z), entonces se llama un homeomorfismo. Un homeomorfismo, que tiene por lo menos una derivada continua (con respecto al tiempo, z) y una inversa continuamente diferenciable, es un difeomorfismo.

La iteración de un mapeo significa aplicar repetidamente el mapeo a las consecuencias de la aplicación anterior. Así nosotros conseguimos una sucesión (ecuación 3.4):

$$z = f(z_{n-1}) = f(f(z_{n-2}) \dots) = f^n(z_0) \quad (3.4)$$

Esta sucesión es la órbita o trayectoria del sistema dinámico con condición inicial z_0 .

Se debe poner énfasis en que un sistema dinámico determinista es absolutamente predecible dado el conocimiento perfecto de la condición inicial, y siempre, en la práctica, es predecible en el término corto. La clave para la no predictibilidad a largo plazo, es una propiedad conocida como sensibilidad a las condiciones iniciales o dependencia sensible a las condiciones iniciales.

3.4. Espacio fase y mapa de retorno

Existen diferentes métodos para representar las características de un sistema dinámico. La representación más conocida es el diagrama en el espacio - fase cuando la señal analizada es continua, o bien el mapa de retorno cuando la señal es una muestra de la señal continua. Se define el mapa de retorno de primer orden como la representación de la señal x_{n+1} respecto a la

señal x_n . De forma similar, se pueden representar los mapas de retorno de orden k como la representación de la señal x_{n+k} respecto a la señal x_n . Todas estas representaciones tienen en común que representan una señal respecto a sí misma retardada un cierto número de veces.

Un ejemplo clásico para entender los diferentes comportamientos que puede tener un sistema no lineal es la llamada ecuación logística (la que representa una aproximación al crecimiento de la población de una especie en un ecosistema), que está definida por la ecuación 3.5:

$$c_{n+1} = cx_n(1 - x_n) \quad (3.5)$$

El valor de la constante c fija el comportamiento del sistema. Obsérvese que si $x_0 = 0$ ó $x_0 = 1$ se obtendrá que $x_{n+1} = 0$ para $n > 0$. Para mostrar los posibles comportamientos se supone $x_0 = 0.25$ en todos los casos y se simula la serie para diversos valores de c . En la figura 3.2, se muestran los resultados para 6 elecciones diferentes del parámetro c .

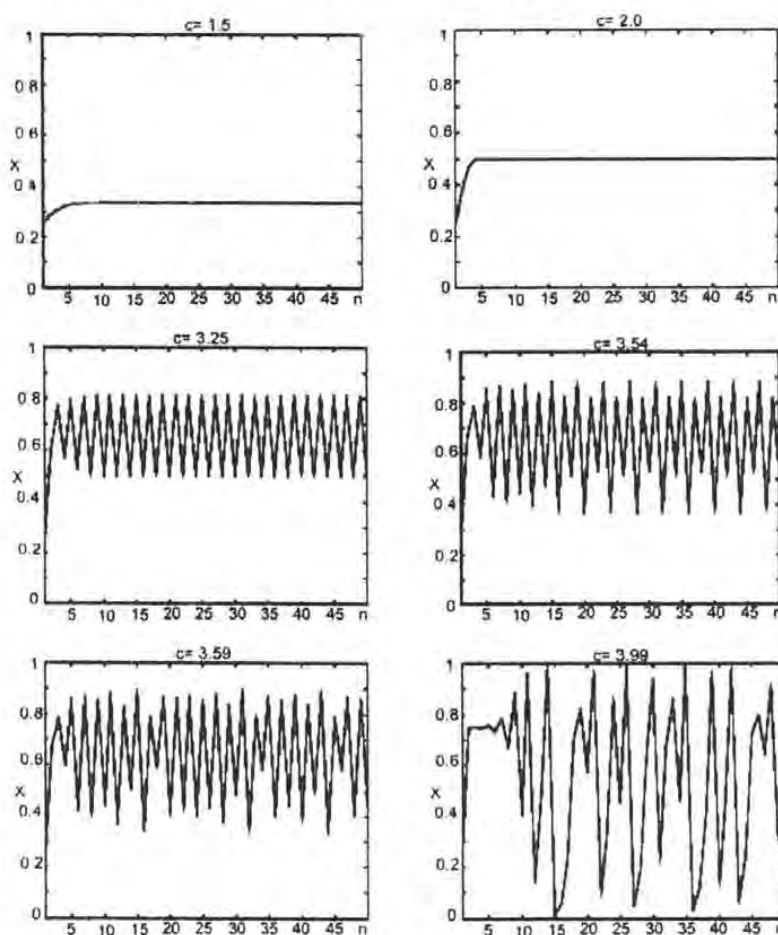


Figura 3.2. Diferentes simulaciones de la ecuación logística para diversos valores de c . La condición inicial es igual a 0.25.

Para valores de c pequeños (menores que 3), la serie converge hacia un punto fijo que depende del valor de c (período 1). Para c entre 3 y 3.45 aparece una oscilación de período 2. A medida que aumenta el parámetro c van apareciendo oscilaciones de otros períodos. Esto es debido al proceso de bifurcación. Un análisis teórico (Denton et al., 1990) revela que a partir de 3.57 se produce el caos. En la figura 3.2, se observa el punto fijo para $c = 1.5$ y $c = 2$. La oscilación de período 2 (primera bifurcación) se muestra para $c = 3.25$. En el caso de $c = 3.54$ se ha producido una segunda bifurcación. Para $c = 3.59$ ya tenemos un proceso caótico en el cual aún puede observarse cierta regularidad (aunque no hay una periodicidad estricta). En el caso de $c = 3.99$ el proceso es claramente caótico. Una de las propiedades que caracterizan a un proceso caótico es su sensibilidad a las condiciones iniciales. En la figura 3.3, se muestran dos series escogiendo $c = 3.99$ y $x_0 = 0.2500$ en un caso y $x_0 = 0.2501$ en el otro. Obsérvese que, aunque al principio ambas series se parecen, al cabo de poco tiempo el comportamiento es completamente diferente.

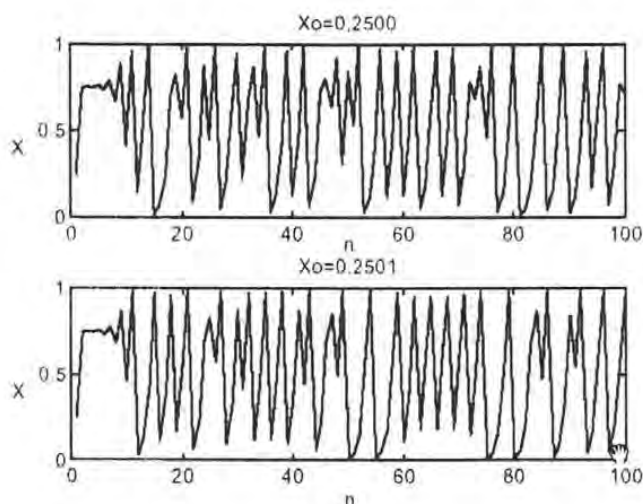


Figura 3.3. Comportamiento de la ecuación logística para $c = 3.99$ y dos condiciones iniciales muy parecidas.

El caso que nos interesa estudiar, es el mapa de retorno cuando la señal es una muestra de la señal continua, esto debido a que los registros de las series de tiempo del ozono que estudiaremos, son una muestra de una serie continua.

Como habíamos mencionado, se define el mapa de retorno de primer orden como la representación de la señal x_{n+1} respecto a la señal x_n . De forma similar se pueden representar los mapas de retorno de orden k como la representación de la señal x_{n+k} respecto a la señal x_n .

Obsérvese que todas estas tienen en común que representan una señal respecto a sí misma retardada un cierto número de muestras.

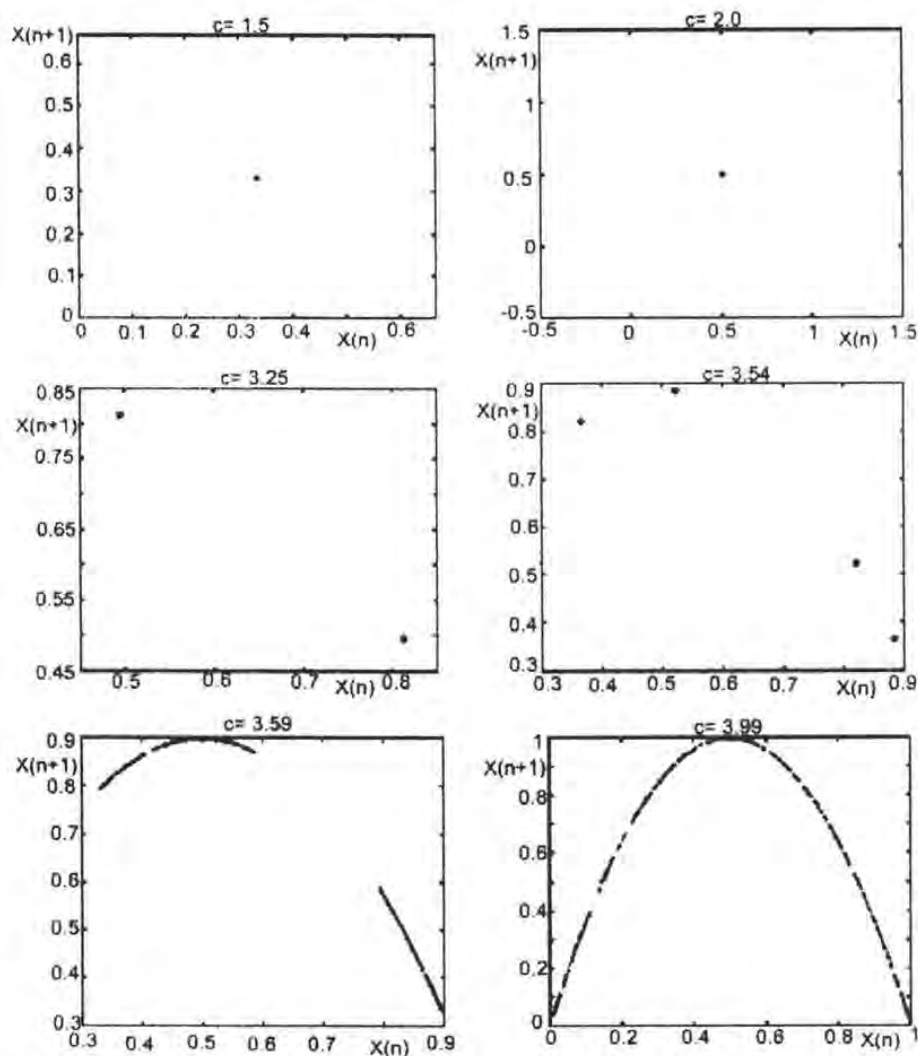


Figura 3.4. Mapas de retorno de primer orden para la ecuación logística para diferentes valores de C .

En la figura 3.4, se presentan mapas de retorno de primer orden para las señales representadas en la figura 3.2. Obsérvese que para los dos primeros casos tenemos un punto fijo, para el tercer caso aparecen dos puntos asociados a la oscilación de período dos y en el cuarto caso tenemos cuatro puntos asociados a la doble bifurcación. Finalmente, el número elevado de puntos que aparecen en los dos últimos casos indica la presencia de caos. Pero hay que remarcar que estos puntos en el mapa de retorno están ordenados, mostrando, evidentemente, la forma del mapa que da origen al proceso (en éste caso, una parábola).

En ciertos casos es interesante aplicar un mapa de retorno de orden mayor. En la figura 3.5, se presentan mapas de retorno de diferentes órdenes para $c = 3.99$. Obsérvese que la traza que aparece en los mapas de retorno es independiente de las condiciones iniciales. Se aprecia también que las trazas que aparecen son las sucesivas composiciones del mapa. El empleo de los mapas de retorno de orden superior a 1 pone de manifiesto la aparición de periodicidades. Por ejemplo, en el caso de una bifurcación de período 2, su mapa de retorno de orden 2 se reduce a un único punto fijo. En la práctica se emplean estos mapas para detectar la presencia de atractores. Dicha presencia sólo es evidente cuando se utiliza un retardo (un orden del mapa de retorno) idóneo.

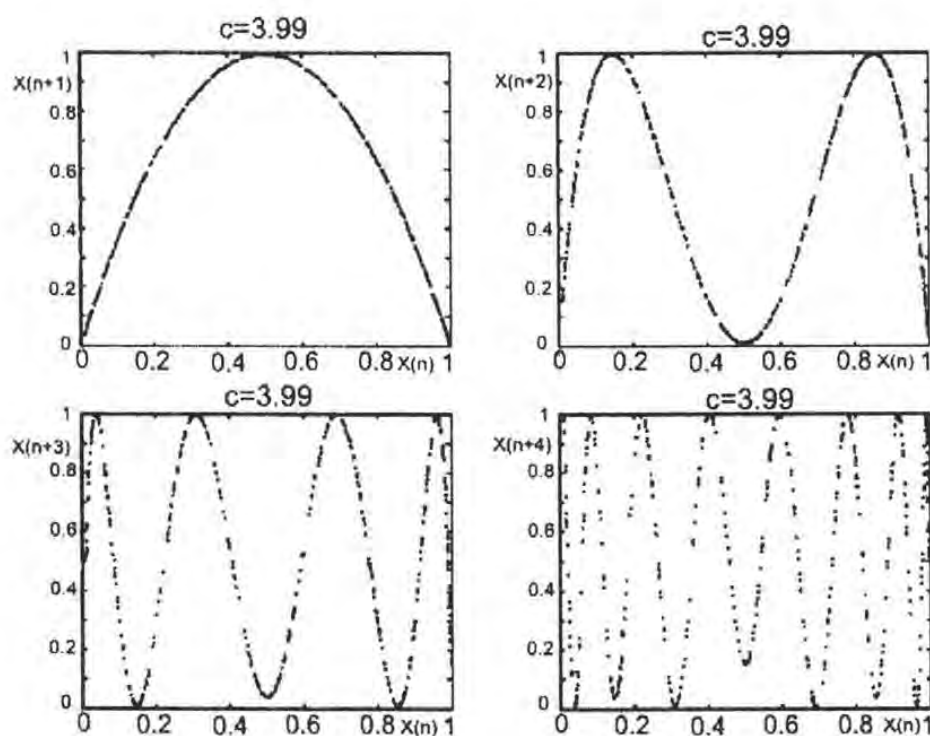


Figura 3.5. Mapas de retorno de orden 1, 2, 3 y 4 para $c = 3.99$ en el caso de la ecuación logística.

Por otro lado, el efecto del ruido sobre la serie a analizar (caso importante en las series de ozono que analizaremos) puede afectar a la interpretación de los mapas de retorno. En la figura 3.6, se muestran los mapas de retorno de primer orden para la ecuación logística ($x_0 = 0.25$, $c = 3.99$), a la cual se ha añadido ruido gaussiano con diferentes niveles de amplitud.

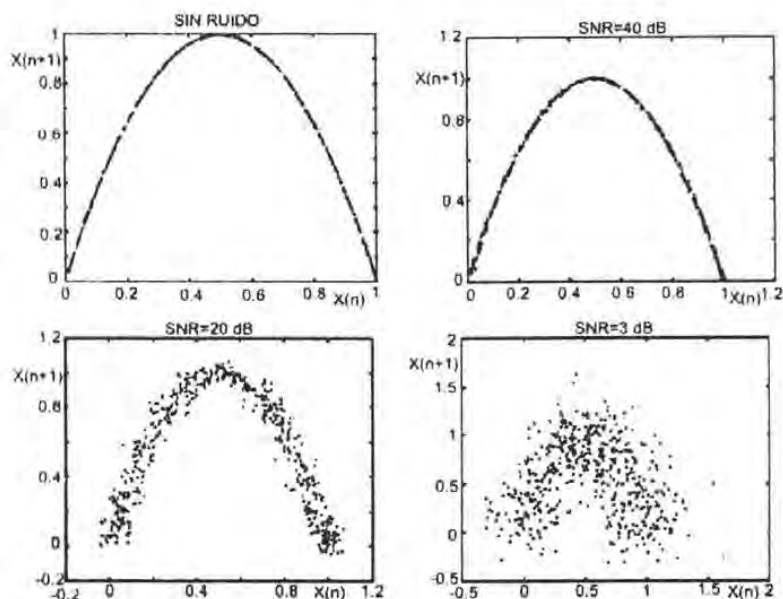


Figura 3.6. Efecto del ruido sobre los mapas de retorno.

Es conocido, que un sistema no lineal, por sencillo que sea, puede presentar una respuesta muy compleja. Cuando la respuesta de un sistema no lineal depende fuertemente de las condiciones iniciales y es poco predecible, se considera que tiene un comportamiento caótico. No se debe confundir un proceso caótico con un proceso aleatorio. Cuando el proceso es caótico, si se conoce con una precisión infinita la condición inicial del sistema se puede saber el estado en cualquier instante. Es decir, *un proceso caótico es determinista aunque poco predecible*.

3.5. Atractor y atractor extraño

Se puede definir caos como aquel comportamiento impredecible que aparece en un sistema dinámico determinístico debido a la sensibilidad a las condiciones iniciales (Denton et al., 1990).

Informalmente un atractor es simplemente un estado en el que un sistema se atrae. Así, en un tiempo largo, un sistema dinámico disipativo puede establecerse en un atractor.

Existen controversias acerca de una definición apropiada de un *Atractor*. Aquí proporcionamos dos de estas:

Conjunto en el espacio fase que tiene un vecino en el que cada punto se queda cercano y se aproxima al atractor cuando el tiempo va al infinito (Russell, et al., 1980).

Conjunto de puntos o un subespacio en el espacio de estados hacia el cual una "historia de tiempo" se aproxima asintóticamente (Moon, 1987).

Imaginemos una pelota que rueda dentro de un cuenco. Si llevamos la pelota a un punto en el cuenco, con una velocidad demasiado pequeña para alcanzar el borde en el futuro, la pelota se establecerá al fondo del cuenco con velocidad cero: así, este punto de equilibrio es un atractor. Los puntos vecinos que en el futuro se acercan al atractor son el cuenco de atracción para el atractor. En este ejemplo el cuenco es el conjunto de todas las configuraciones que corresponden a la pelota en el cuenco, y para cada punto corresponden velocidades pequeñas más que suficientes (es un conjunto en la cuarta dimensión del espacio - fase).

Existen varios tipos de atractores (Orduña, 2001):

- El atractor de punto fijo, que representa un estado estable,
- El atractor de ciclo límite representativo de un régimen periódico,
- El atractor toroidal, que representa un régimen cuasi periódico y
- Los atractores extraños, que son atractores a los cuales se les puede asociar una dimensión fractal (Rasband, 1990).

Existen atractores extraños caóticos y no caóticos.

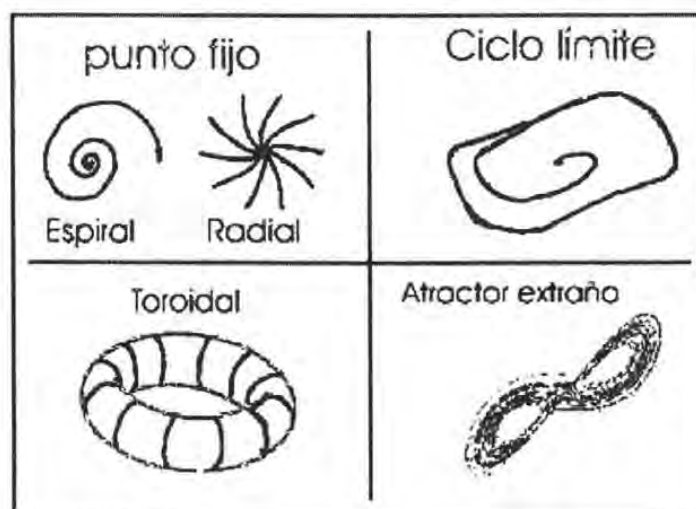


Figura 3.7. Tipos de atractores

El término atractor extraño fue introducido por Ruelle y Takens en 1971 en su discusión sobre la presencia de la turbulencia en el flujo de fluidos. Notaron que, cuando el movimiento periódico es inestable (con tres o más modos), el resultado típico será un objeto geoméricamente extraño. Desgraciadamente, el término atractor extraño se usa a menudo para cualquier atractor caótico. Sin embargo, el término debe reservarse para atractores que sean "geoméricamente" extraños (fractal) (Moon, 1987).

La presencia de un atractor extraño puede conducir a una complicada serie de tiempo y es mejor revelada en las gráficas de espacio - fase, si los datos fueron tomados en intervalos de tiempo suficientemente cortos y no presentan un componente de "ruido" suficientemente significativo, entonces las graficas de espacio - fase pueden ser construidas con los componentes $x(t)$ y dx/dt , y derivadas de alto orden y entonces, el conjunto de datos deberá ser representado como una trayectoria en el espacio - fase. El procedimiento deberá ser estimado tan alto en el espacio - fase altamente dimensional hasta que el incremento en el orden no cambie la topología de la estructura subyacente. Por ejemplo, una gráfica en un espacio bidimensional de la trayectoria para un lazo simple (entrecruzamiento sobre si mismo) deberá permanecer como un lazo simple si es graficada en un espacio altamente dimensional.

La noción de caos parece chocar con lo que estableció Laplace: Dado el conocimiento preciso de las condiciones iniciales, debe ser posible predecir el futuro del universo. Sin embargo, el *dictum* de Laplace es ciertamente verdad para cualquier sistema determinista. La consecuencia principal de movimiento caótico es que, dado el conocimiento imperfecto, el horizonte de predictibilidad en un sistema determinista es más corto de lo que uno podría esperar debido al crecimiento exponencial del error. La creencia de que los errores pequeños deben tener consecuencias pequeñas fue generada quizás por el éxito de la mecánica de Newton aplicado a los movimientos planetarios. Aunque esto puede ser regular en la escala de tiempo histórico humano, ellos presentan un movimiento caótico sobre los 5 millones de años de la escala de tiempo.

3.6. Dependencia a las condiciones iniciales

Para explicar la dependencia sensible a las condiciones iniciales, se puede considerar un cuenco colocado inestablemente en la cima de una colina ideal. El empujón más ligero causará que el cuenco ruede hacia abajo por uno u otro lado de la colina: la conducta subsiguiente

depende sensiblemente de la dirección del empujón y el empujón puede ser arbitrariamente pequeño.

La dependencia sensible es la conducta equivalente para cada condición inicial, cada punto en el espacio - fase se coloca eficazmente en la cima de una colina. La dependencia sensible no requiere crecimiento exponencial de perturbaciones (exponente de Lyapunov positivo. *Ver más adelante*), pero esto es típico para los sistemas caóticos. También no se requiere definitivamente que todos los puntos iniciales cercanos diverjan (genéricamente esto no pasa), algunos puntos cercanos pueden converger. Finalmente, las palabras "condiciones iniciales" son una perturbación pequeña típica introducida que en cualquier momento crecerá en forma similar. Pensemos en "inicial" como significando "un tiempo cuando una perturbación o el error se introduce," no necesariamente en el tiempo cero.

3.7. Fractal

Los sistemas caóticos exhiben a menudo estructuras fractales. Un fractal es un conjunto de puntos que no se parece a un objeto euclidiano (punto, recta, plano) independientemente de la escala con la que se mire. Un fractal es una curva o superficie que es independiente de la escala (Mandelbrot, 1983). Una definición muy aplicada en el análisis de señales caóticas es "Un fractal es un conjunto para el cual la dimensión de Hausdorff - Besicovitch excede estrictamente la dimensión topológica" (Mandelbrot, 1983). Los fractales son los sistemas que aparentan tener una estructura compleja, no importando la escala que se utilice para examinarlas. Los fractales verdaderos son sistemas infinitos y presentan auto-semejanza a través de todas las escalas, considerando la misma calidad de la estructura mientras que se enfoca adentro de ellas.

El desarrollo de la geometría fractal ha sido uno de los sucesos matemáticos más fascinantes, el darnos cuenta de que los sistemas no lineales producen fractales resulta muy interesante. La mayor parte de la naturaleza y las series de tiempo son mejor descritas con fractales. La naturaleza es no lineal y los fractales son la geometría del caos.

Un fractal se puede generar de distintas formas. La manera más simple es tomar una regla sencilla e iterarla una y otra vez. Si observamos la figura 3.8, resulta de tomar un triángulo sólido equilátero, quitar el triángulo invertido dentro del triángulo original, y repetir el proceso sobre cada parte sólida restante. Así, tenemos complejidad infinita dentro de un espacio finito.

Este fractal es llamado el triángulo de Sierpinski. Si tratáramos de aplicar la geometría euclidiana a esta figura, no podremos, ya que no es una línea de una dimensión, ni tampoco un triángulo sólido de dos dimensiones pues tiene agujeros. Su dimensión está entre 1 y 2, una dimensión fraccionaria o fractal (aproximadamente 1.58). Este tipo de dimensiones no enteras son típicas en los fractales.



Figura 3.8. Triángulo de Sierpinski. Ejemplo de fractal

Otro ejemplo de un fractal es el copo de nieve de Koch (Fig. 3.9). Para crearlo se empieza con un triángulo equilátero, a continuación añadimos un triángulo equilátero al tercio medio de cada lado del triángulo original, se le quita la base y repetimos este proceso una y otra vez.



Figura 3.9. Copo de nieve de Koch

A diferencia del triángulo de Sierpinski, esta vez se usa una regla aditiva. La curva de Koch, tiene longitud infinita, dentro un espacio finito pues los triángulos pueden ser agregados de manera infinita.

Los dos fractales anteriores son simétricos, y aunque ayudan a comprender los fractales, existen también fractales aleatorios, no simétricos. Las líneas costeras son un buen ejemplo de un fractal aleatorio. Por ejemplo, Mandelbrot expuso que no hay proceso o fórmula para la construcción de la línea costera de Gran Bretaña. La única manera de conseguir la longitud de la línea de la costa es medirla.



Figura 3.10. Costa de Gran Bretaña

Podemos medir la costa en un mapa geográfico tomando la regla fijada en cierta longitud. Para una escala en metros de 1:1000,000, la longitud de la regla de 5 centímetros correspondería a 50 kilómetros. Ahora podemos guiar la regla a lo largo de la costa. Esto daría una representación poligonal de la costa de Gran Bretaña según se muestra en la figura 3.10. Para obtener la longitud de la costa, podemos contar el número de movimientos, multiplicar el número de movimientos de 5 centímetros y convertir el resultado a km. Ajustes más pequeños de la regla darían lugar a polígonos más detallados y a valores asombrosamente más grandes de las medidas (Peitgen, et al., 1992).

Las curvas, superficies, y volúmenes pueden ser tan complejos que las medidas ordinarias como la longitud, área y el volumen llegan a tener un sin sentido. Sin embargo, uno puede medir el grado de complejidad evaluando que tan rápidamente aumentan estas medidas si medimos con escalas cada vez más pequeñas. La idea fundamental es asumir que la medida y la escala no varían arbitrariamente pero están relacionadas por la ley de la potencia que permite que calculemos uno del otro. La ley de la potencia se puede indicar como $Y = \alpha X^d$, donde X es la escala usada para medir la cantidad Y , α y d son constantes. d es una cantidad útil para describir la dimensión fractal.

Las dimensiones fractales son siempre más pequeñas que el número de grados de libertad (Grassberger y Procaccia, 1983a), es decir, es más pequeña de 2 para los objetos geométricos de dos dimensiones, más pequeño de 3 para los tridimensionales. En términos simples, la dimensión fractal puede ser vista como la indicación de cuánto más cercano a una dimensión geométrica es un sistema dado. Todas las diferentes dimensiones están relacionadas. Algunas veces estas son compatibles unas con otras, dando los mismos valores, y algunas veces

difieren uno de otro dependiendo de la distribución del sistema en el que están siendo aplicadas.

La definición geométrica de la dimensión fractal está dada en la ecuación 3.6:

$$D_f = \frac{\log\left(\frac{L_2}{L_1}\right)}{\frac{S_1}{S_2}} \quad (3.6)$$

Donde L_2 y L_1 son las longitudes estimadas con las reglas 2 y 1 mientras que S_2 y S_1 son las longitudes de las reglas. La dimensión fractal es un número situado entre la dimensión euclidiana y la dimensión euclidiana más uno del objeto que se mide. Es decir, para una curva variará entre 1 y 2. La definición anterior también es conocida como la *dimensión de Hausdorff*, o *dimensión de capacidad*, la cual, describe la dimensión geométrica de un atractor (Duvall et al., 2000).

Una vez que un atractor extraño ha sido identificado, su naturaleza puede ser cuantificada calculando varias medidas de su dimensión y su exponente de Lyapunov. La dimensión es una medida de la complejidad de la trayectoria del espacio – fase en donde el exponente de Lyapunov es una medida de la sensibilidad a las condiciones iniciales. En orden de tener una medición correcta de la dimensión de un atractor es necesario encajarlo en un espacio de dimensión de por lo menos $2d+1$, en donde d es la menor dimensión de la integral que incluye al atractor.

3.8. Dimensión de capacidad

Existen varias formas para definir la dimensión de un atractor. La más simplista es la de *Hausdorff* o *dimensión de capacidad* (Nayfeh y Balachandran, 1995), la cual describe la dimensión geométrica del atractor sin considerar que tan frecuentemente la trayectoria visita varias localidades sobre el atractor. La *dimensión de correlación* es el límite menor sobre la *dimensión de capacidad*, pero en muchos casos, está muy cercana a la *dimensión de capacidad*. La *dimensión de correlación* es más exacta para conjuntos de datos pequeños porque su peso es más pesado en estas regiones del espacio encajado que contiene datos.

En general es difícil calcular una *dimensión de capacidad* cuando la dimensión es mayor que aproximadamente dos. El número de datos o puntos requeridos para una estimación fiable de la dimensión es en el orden de M^d en donde M ha sido estimada que está en el rango de entre 10 a 42. Se aplican consideraciones similares para el cálculo del exponente de Lyapunov (Sandri, 1996), aunque parece que una dimensión más pequeña es suficiente. La fiabilidad de los resultados depende del sistema, y no se conocen todos los métodos rigurosos para determinar el error en todos los sistemas.

En la práctica, se puede estimar la *dimensión fractal* de un atractor extraño mediante la *dimensión de capacidad* d_{cap} .

Para encontrar la *dimensión de capacidad* de un sistema, asumimos que el número de elementos que cubren un conjunto de datos es inversamente proporcional a ε^D , donde ε es la escala de los elementos de la cubierta y D es una constante. Por ejemplo, si tenemos un segmento de línea e intentamos cubrir el segmento con cuadrados de cierto tamaño, y encontramos que necesitamos tres cuadrados. Si entonces intentamos ver cuántos cuadrados de la mitad del tamaño original fueron requeridos para cubrir el segmento, podríamos esperar tener seis cuadrados para cubrir el segmento, que es dos veces el número de los cuadrados necesitados cuando los cuadrados estaban a su tamaño original. Así, el número de cuadrados requeridos para cubrir el segmento es inversamente proporcional al tamaño de los cuadrados (Fig. 3.11).

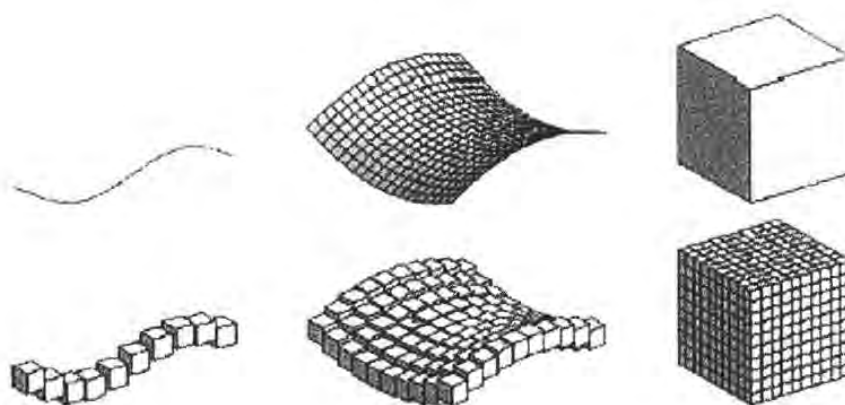


Figura 3.11. Cubriendo una curva, un plano y un cubo sólido con cubos de lado $\varepsilon = 1/2^n$

La cubierta de cualquier curva suave, continua se comporta de la misma manera, a condición de que el tamaño de los cuadrados sea bastante pequeño, de modo que la curva sea aproximada bien por segmentos de la línea recta en esa escala.

Así, para los objetos unidimensionales, vemos que

$$N(\varepsilon) \approx \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.7)$$

donde ε es el lado del cuadrado, $N(\varepsilon)$ es el número de cuadrados de ese tamaño requerido para cubrir el sistema, y k es una constante. Ahora suponemos que estamos cubriendo un desecho de papel con los pequeños cuadrados. En este caso, si partimos en dos el tamaño de los cuadrados, llevaría cuatro de los cuadrados más pequeños para cubrir lo que uno de los cuadrados más grandes cubriría, y así que esperaríamos que $N(\varepsilon)$ aumentara en un factor de cuatro cuando ε se parte en dos. Esto es consistente con una ecuación de la forma,

$$N(\varepsilon) \approx \frac{k}{\varepsilon^2} \quad (3.8)$$

Esto parece razonable para sistemas más arbitrarios,

$$N(\varepsilon) \approx \frac{k}{\varepsilon^D} \quad (3.9)$$

donde D es la dimensión del sistema. Es decir, podemos esperar medir cuánto del espacio de dos dimensiones de algún subconjunto de este se acerca para examinar cómo el sistema se puede cubrir eficientemente por células de diverso tamaño.

Para encontrar D de $N(\varepsilon) \approx k/\varepsilon^D$, podemos solucionar la ecuación para D , tomando el límite cuando $\varepsilon \rightarrow 0$. Esto es, la capacidad del método para estimar D . Si asumimos que el sistema es escalado para que se ajuste en un cuadrado con lado 1, entonces tenemos $N(1) = k = 1$. Esto da la ecuación,

$$D_{cap} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log(N(\varepsilon))}{\log(1/\varepsilon)} \quad (3.10)$$

donde $N(\varepsilon)$ es el número de cubos de lado ε , o de esferas p -dimensionales de radio ε requeridas para cubrir el atractor.

3.9 Dimensión de Correlación

Una mejor aproximación a la dimensión fractal se puede calcular vía la dimensión de correlación, también llamada dimensión de Grassberger y Procaccia, así $d_f \approx d_G$ (Grassberger y Procaccia, 1983c).

La dimensión de correlación es el límite bajo sobre la dimensión de capacidad, pero en la mayoría de los casos, es una aproximación cercana a la dimensión de capacidad. La dimensión de correlación se puede calcular usando las distancias entre cada par de puntos en el sistema de N puntos,

$$S(i, j) = |X_i - X_j| \quad (3.11)$$

$C(r)$ se encuentra siguiendo una ley de la potencia similar a la que se vio en la dimensión de capacidad: $C(r) = Kr^D$. Por lo tanto, podemos encontrar la dimensión de correlación D_{corr} con las técnicas de estimación derivadas de la ecuación:

$$D_{\text{corr}} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\log(C(r))}{\log(r)} \quad (3.12)$$

$C(r)$ puede ser escrita de la forma (Balankin, 1996).

$$C(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N(N-1)} \sum_{j=1}^M \sum_{i=j+1}^M H(r - |r_i - r_j|) \quad (3.13)$$

Siendo H la función de Heaviside. La integral $C(r)$ cuenta el número de pares de puntos (con coordenadas r_i y r_j) tal que $r < |r_i - r_j|$

Este algoritmo está descrito en (Grassberger y Procaccia., 1983c). Calculando la expresión (3.13) para diferentes radios, y teniendo en cuenta que el mínimo r vendrá fijado por los pasos de cuantificación, se puede realizar la estimación de la dimensión de correlación para diferentes dimensiones de análisis.

El análisis de la dimensión de correlación intenta representar los datos en términos de un conjunto finito de funciones ortogonales. El número de funciones en el conjunto es el de eigenvalores significativos de la matriz de correlación.

Decidir que número de eigenvalores son significativos requiere de un juicio subjetivo, pero no se debe olvidar que la finalidad es simplificar, lo cual en este contexto significa un pequeño número de eigenvalores, al menos 3 eigenvalores son necesarios para generar caos en un sistema descrito por ecuaciones diferenciales.

Íntimamente ligada al concepto de dimensión fractal está la definición del **exponente de Hurst** (Hurst, 1951), que está relacionado con el comportamiento de la serie a analizar a distintas escalas, para luego calcular la dimensión fractal aplicando $D_F = D_e - H$, donde D_F es la dimensión fractal, D_e es la dimensión euclídeana (igual a 2 para series temporales) y H es el exponente de Hurst.

El exponente de Hurst cuantifica la dinámica caótica de las series temporales a analizar, tiene una gran cantidad de aplicaciones a toda serie de tiempo pues es altamente robusto. Tiene unos cuantos supuestos sobre el sistema que es estudiado, y puede clasificar las series de tiempo. Puede distinguir una serie aleatoria de una que no lo es, inclusive, si la serie no tiene la distribución Gaussiana. Hurst encontró que la mayoría de los sistemas naturales no siguen una caminata aleatoria, gaussiana o de otra índole.

Para $H = 0.5$ la serie se comporta como un movimiento browniano o aleatorio. Para $0.5 < H < 1$ tiene un aspecto "suave", esto significa que las observaciones no son independientes, cada observación posee memoria de todos los eventos que la preceden; esta no es una memoria de corto plazo, ésta memoria es de largo plazo, así los eventos más recientes tienen mayor impacto que los más distantes pero, aún así, éstos últimos siguen teniendo algún efecto residual. En una escala mayor, un evento que exhibe las estadísticas de Hurst es el resultado de un gran flujo de sucesos interconectados. Lo que pasa hoy influencia el futuro, dónde estamos ahora es un resultado de adonde estuvimos en el pasado. Así las series de tiempo que

presentan exponentes de Hurst $0.5 \leq H \leq 1.0$ se definen como series de tiempo persistentes. Los valores de $0 \leq H \leq 0.5$ del exponente de Hurst representarán una serie antipersistente, o sea, un sistema sujeto a más reveses y las curvas se caracterizan por un contenido mayor de alta frecuencia.

3.10. Exponente de Lyapunov

Los exponentes de Lyapunov nos indican la sensibilidad o dependencia de los estados futuros de un sistema bajo ciertas condiciones iniciales. Cuantifican la velocidad promedio a la cual se separan dos trayectorias inicialmente próximas en el espacio fase. Una perturbación infinitesimal inicial por lo general crecerá exponencialmente y a la razón de crecimiento que tenga se le llama el *exponente de Lyapunov*. Si el exponente es negativo, las trayectorias poco separadas en el inicio tenderán a converger y la evolución no será caótica. Por el contrario, si el exponente es positivo las trayectorias divergen y la evolución es sensible a las condiciones iniciales y por tanto es caótica.

El mecanismo por el cual se genera el caos puede resumirse en dos operaciones sobre el espacio fase,

a) Un estiramiento en el cual las trayectorias se separan de modo exponencial, es decir, las ecuaciones actúan como una especie de microscopio.

b) Un plegamiento de este espacio fase que hace que las trayectorias se mezclen, perdiéndose por tanto la relación con las condiciones iniciales.

El exponente de Lyapunov proporciona una medida cuantitativa de la primera operación, (a).

Sea un sistema caótico descrito por una ecuación recurrente del tipo

$$x_{n+1} = f(x_n),$$

El exponente de Lyapunov, $\lambda(x_0)$ representa la separación exponencial entre dos trayectorias, inicialmente próximas, al cabo de N pasos o iteraciones. En la figura 3.12 se muestra el significado del exponente de Lyapunov.



Figura 3.12. Explicación gráfica del significado del exponente de Lyapunov.

De la figura 3.12, se deduce que

$$\varepsilon e^{\lambda(x_0)} = |f^N(x_0 + \varepsilon) - f^N(x_0)| \quad (3.15)$$

Despejando y tomando límites cuando $N \rightarrow \infty$ y $\varepsilon \rightarrow 0$ se obtiene una definición formal del exponente de Lyapunov:

$$\lambda(x_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{N} \log \left| \frac{f^N(x_0 + \varepsilon) - f^N(x_0)}{\varepsilon} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \left| \frac{df^N(x_0)}{dx_0} \right| \quad (3.16)$$

$\varepsilon e^{\lambda(x_0)}$ representa el valor promedio de separación entre dos trayectorias al cabo de una iteración, lo que expresado en función de la $\varepsilon e^{t\lambda}$ variable temporal representa la separación de dos puntos inicialmente próximos al cabo de un tiempo t .

Es difícil calcular exponentes de Lyapunov negativos, ya que el transitorio debido a ellos desaparece rápidamente, mientras que el debido a los positivos es más duradero. Por esta razón se calcula normalmente el máximo exponente de Lyapunov (Lerma, 2001).

Para que un sistema dinámico sea caótico debe tener un “amplio” conjunto de condiciones iniciales cuyo punto de equilibrio es inestable. No importa qué tan precisamente se mida la condición inicial en estos sistemas, la predicción de su subsiguiente movimiento es sumamente mala en un tiempo corto. Típicamente, el horizonte de predictibilidad sólo crece logarítmicamente con la precisión de la medida. Así, para cada aumento en precisión por un factor de 10, sólo podremos predecir dos unidades de tiempo más (medidas en unidades del tiempo de Lyapunov, es decir el inverso del exponente de Lyapunov).

La no predictibilidad de la señal se puede cuantificar con los exponentes de Lyapunov. El criterio para detectar caos es: Si $\lambda_{MAX} > 0$ se tiene divergencia exponencial, lo que indica comportamiento caótico, siempre y cuando la serie de tiempo analizada no incluya algún tipo de ruido, en cuyo caso es posible que el exponente de Lyapunov sea positivo. Por otro lado, si $\lambda_{MAX} \leq 0$, esto indica movimiento regular, el cual a su vez puede ser periódico o

multiperiodico. El inverso del exponente de Lyapunov $1/\lambda_{MAX}$ es un indicador del límite de predictibilidad de un sistema dinámico caótico.

Hay tantos exponentes de Lyapunov como dimensiones en el espacio de estados del sistema, pero el más grande normalmente es el más importante.

El punto crítico en la determinación de la dimensión de correlación y de los exponentes de Lyapunov reside en la elección de la dimensión de incrustamiento o embebimiento. Ésta se puede estimar a partir de diversos cálculos de la dimensión de correlación con dimensiones de incrustamiento diferentes. En señales caóticas, la dimensión de correlación tiende a saturarse a un valor determinado cuando la dimensión de incrustamiento aumenta. En cambio, para señales aleatorias, dado un retardo y una dimensión de incrustamiento conocida, no hay tal saturación.

3.11. Entropía de Kolmogorov

Otro de los criterios utilizado para detectar caos consiste en calcular la Entropía de Kolmogorov (Grasbberger y Procaccia, 1983b; Termonia, 1984). A semejanza de la entropía termodinámica, mide la pérdida de información que experimenta el sistema en su evolución y normalmente se expresa en bit/ s, siendo el bit el habitual dígito binario (1 ó 0).

Considérese un sistema dinámico con F grados de libertad. Se supone que el espacio fase F-dimensional se divide en cajas de tamaño ε^F y que existe un atractor cuya trayectoria $x(t)$ se encuentra en la cuenca de atracción; si se hacen mediciones en el sistema a intervalos regulares de tiempo τ , entonces, la probabilidad de que $x(t = \tau)$, visite la caja i_1 , $x(t = 2\tau)$ visite la caja i_2, \dots , y $x(t = d\tau)$ visite la caja i_d es $p(i_1, \dots, i_d)$. La entropía de Kolmogorov, se define como (ecuación 3.17):

$$K = -\lim_{\tau \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{d \rightarrow \infty} \frac{1}{d\tau} \sum_{i_1, \dots, i_d} p(i_1, \dots, i_d) \ln p(i_1, \dots, i_d) \quad (3.17)$$

En sistemas deterministas no hay pérdida de información, en consecuencia la entropía de Kolmogorov es nula. En sistemas absolutamente aleatorios se pierde toda la información, la entropía de Kolmogorov tiende a infinito. En sistemas caóticos toma valores altos pero finitos.

El criterio es el siguiente:

1. Si $K = 0$, se tiene un sistema regular (posiblemente periódico o multiperiodico),
2. si K tiene un valor finito el sistema es caótico, y
3. si K tiende a infinito el sistema es aleatorio.

También es usual calcular la llamada entropía espacio-temporal porcentual, que se denota por $K\%$; aquí los criterios para detectar caos son los siguientes:

1. Si $K\% = 0$ el sistema es periódico,
2. si $K\%$ es mayor que 0% y menor que 100% el sistema es caótico, y
3. si $K\%$ es del 100% el sistema es aleatorio.

En síntesis, la entropía de Kolmogorov mide el promedio de información sobre el estado de un sistema dinámico que se pierde con el tiempo. En sistemas unidimensionales es igual al exponente de Lyapunov, mientras que en sistemas de dimensión mayor es la suma de los exponentes de Lyapunov positivos. En todo caso es inversamente proporcional al tiempo en el cual el estado de un sistema caótico se puede predecir.

3.12. Transformada de Fourier

El *teorema de Fourier*, permite demostrar que toda función periódica continua, con un número finito de máximos y mínimos en cualquier periodo, puede desarrollarse en una única serie trigonométrica uniformemente convergente a dicha función, llamada *serie de Fourier*.

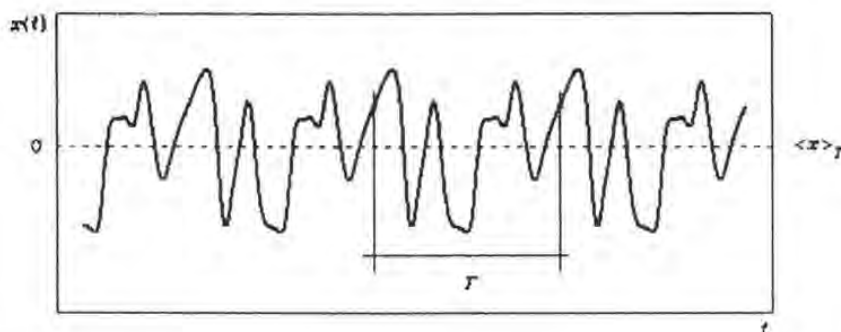


Figura 3.13. Ejemplo de vibración periódica

Suponiendo que la función $x(t)$ de la Fig. 3.13 tuviera un período T , es decir, que se repitiera transcurrido el tiempo T tal que $x(t) = x(t+T)$, para todo t , dicha función puede desarrollarse en una serie de la forma

$$x(t) = a_0 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \left[a_k \cos\left(\frac{2\pi kt}{T}\right) + b_k \text{sen}\left(\frac{2\pi kt}{T}\right) \right] \quad (3.18)$$

Las funciones $\text{sen}(2\pi kt / T)$ y $\cos(2\pi kt / T)$ representan funciones armónicas simples de frecuencia

$$w_k = \frac{2\pi k}{T} \quad \text{rad / seg} \quad (3.19)$$

por lo tanto, la serie anterior puede interpretarse como la suma de infinitas ondas armónicas simples de *amplitudes* dadas por a_k para las coseno y b_k para las seno, y con *frecuencias* w_k .

Las amplitudes a_k y b_k reciben el nombre de *coeficientes de Fourier* y pueden obtenerse evaluando las integrales

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{T} \int_0^T x(t) dt \\ a_k &= \frac{2}{T} \int_0^T x(t) \cos \frac{2\pi kt}{T} dt \\ b_k &= \frac{2}{T} \int_0^T x(t) \text{sen} \frac{2\pi kt}{T} dt \end{aligned} \quad (3.20)$$

El coeficiente a_0 corresponde al valor medio de la función en el período T , es decir,

$$a_0 = \frac{1}{T} \int_0^T x(t) dt = \bar{x}_T \quad (3.21)$$

y puede hacerse cero si se escoge adecuadamente el cero del eje x , de modo que coincida con la media de x , a lo largo de su período T . Entonces, $a_0 = \langle x_T \rangle = 0$, tal como se muestra en la Fig. 1.

En la Fig. 3.14, se muestra la representación gráfica de cada uno de los coeficientes de Fourier para una hipotética vibración $x(t)$. Representamos en dos cuadros distintos los conjuntos $\{a_k\}$ y $\{b_k\}$ que definen el eje de ordenadas de cada cuadro. El eje de abscisas es el mismo en los dos y queda definido por la frecuencia w_k de cada una de las ondas armónicas

simples. Hay que prestar atención al hecho de que el eje de frecuencias es discreto, y que su unidad de escala viene dada por

$$\Delta\omega = \frac{2\pi}{T} \quad (3.22)$$

y por lo tanto, cuanto mayor sea el período T , menor será el espacio entre las frecuencias y por consiguiente será mayor la resolución frecuencial que podamos obtener.

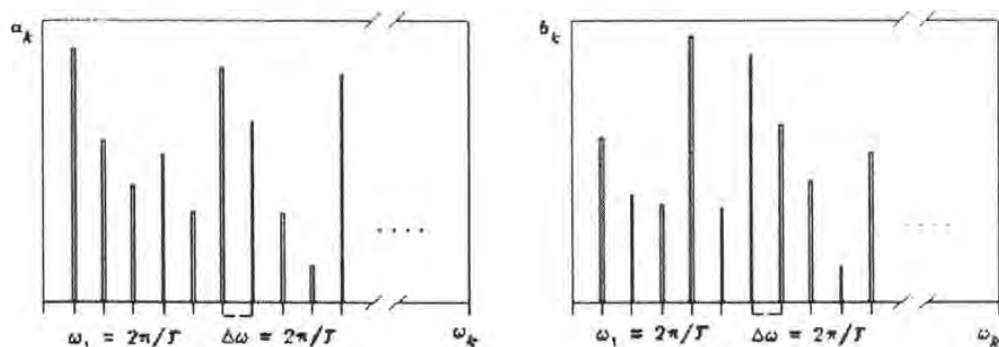


Fig. 3.14. Representación gráfica de los coeficientes de Fourier.

Integral de Fourier

El análisis anterior sirve para funciones periódicas infinitas y en la práctica, estas nunca existen. Para avanzar en el desarrollo de la teoría del análisis de Fourier, debemos plantearnos el caso de una vibración cuyo período T sea ∞ , lo cual equivale a decir que la vibración no tiene período.

En el caso límite de que $T \rightarrow \infty$, los coeficientes se solapanán, puesto que según (3.22), $\Delta\omega \rightarrow 0$. Entonces, los coeficientes de Fourier discretos $\{a_k\}$ y $\{b_k\}$ se transforman en las funciones continuas $A(\omega)$ y $B(\omega)$. Dichas funciones pasan a denominarse las componentes de la transformada de Fourier de $x(t)$ y quedan definidas por las integrales.

$$\begin{aligned} A(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \cos \omega t \, dt \\ B(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \sin \omega t \, dt \end{aligned} \quad (3.23)$$

Por otra parte, la serie de Fourier (ec. 3.18) se convertirá en la *integral de Fourier* o también llamada *transformada inversa de Fourier*, dada por

$$x(t) = 2 \left(\int_0^{\infty} A(\omega) \cos \omega t \, d\omega + \int_0^{\infty} B(\omega) \operatorname{sen} \omega t \, d\omega \right) \quad (3.24)$$

Puesto que $x(t)$ ya no es periódica, la condición para que se cumplan (3.23) y (3.24) es que

$$\int_{-\infty}^{\infty} x(t) \, dt < \infty \quad (3.25)$$

lo que viene a expresar el hecho de que aunque $x(t)$ esté definida en el intervalo $(-\infty, +\infty)$, tiene que tener una “vida” limitada, es decir, que $x(t) = 0$ cuando $t = \pm \infty$.

En resumen, una integral de Fourier puede ser considerada como el límite formal de una serie de Fourier cuando el período tiende a infinito, lo cual permite el tratamiento de funciones no-periódicas o aleatorias.

Forma compleja de la transformada de Fourier

Por razones de utilidad es conveniente agrupar las dos funciones reales de (3.24), mediante una función compleja. Teniendo en cuenta que

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \operatorname{sen} \theta, \quad \text{donde } i = \sqrt{-1}, \quad (3.26)$$

Podemos definir la función compleja

$$F(\omega) = A(\omega) - iB(\omega), \quad (3.27)$$

Donde $A(\omega)$ es la parte real y $B(\omega)$ es la parte imaginaria de $F(\omega)$, obteniéndose la expresión equivalente a (3.24)

$$F(w) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-iwt} dt, \quad (3.28)$$

la cual es la forma compleja de la transformada de Fourier de $x(t)$.

Del mismo modo, la expresión de $x(t)$ dada en (3.25), puede ser evaluada en términos de la función compleja $F(w)$, lo que nos da la forma compleja de la transformada inversa de Fourier

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(w) e^{iwt} dw \quad (3.29)$$

La información contenida en $x(t)$ es la misma que en $F(w)$, solo que expuesta desde una perspectiva diferente. En $x(t)$ representamos la información en su dimensión *temporal*, mientras que en $F(w)$ se representa la misma información en su dimensión *frecuencial*. Es como si, de un mismo objeto, pudiéramos obtener dos puntos de vista distintos de tal modo que se pusieran de relieve propiedades distintas del mismo desde cada una de las perspectivas.

La ventaja de este método es que sirve para analizar una función cuyas propiedades periódicas son totalmente desconocidas.

El análisis espectral es insensible al ruido pero, su aplicación está limitada a determinar la presencia o ausencia de señales periódicas. El análisis espectral, por sí solo, no puede distinguir un proceso caótico de uno aleatorio. Pero sí permite distinguir entre señales con comportamiento periódico y señales no periódicas.

3.13. Tabulación de resultados

En el cuadro 3.2, más adelante, se muestran los resultados que se pueden obtener de cada una de las pruebas sobre señales periódicas, caóticas y aleatorias a partir de una señal desconocida.

Con base en las definiciones y conceptos vistos en este capítulo, se efectuará el análisis al que serán sometidos los registros de ozono de las estaciones de monitoreo atmosférico para establecer el comportamiento dinámico de la contaminación por ozono en la Zona Metropolitana del Valle de México.

Cuadro 3.2. Resultados esperados de las técnicas sobre datos experimentales (Noriega, C.M., 1998; Tufillaro et al., 1992).

| TÉCNICA | PERIÓDICO | CAÓTICO | ALEATORIO |
|---|---|---|--|
| Recurrencia Visual (mapeo de retorno) | Estructura definida y distribución de colores uniforme | Bandas, espacios vacíos, dependencia sensible al estado inicial | Ninguna estructura |
| Recurrencia Visual Fluctuaciones de nivel. Método del conteo de cuadros de nivel | Estructura definida y distribución de colores uniforme en todos los niveles | Bandas, espacios vacíos en todos los niveles | Fluctuaciones en estructura definida y la presencia de bandas y espacios vacíos en los diferentes cuadros de nivel |
| Entropía espacio temporal | 0% | 0 – 100% | Cercana a 100% |
| Frecuencia dominante | Pico de frecuencia bien definida | Sin frecuencia aparente | Muchos picos de frecuencia aleatorios |
| Dimensión de correlación | $D_c \leq 0$ | ----- | ----- |
| Entropía de Kolmogorov | $K = 0$ | $K \rightarrow \infty$ | $0 < K < \infty$ |
| Exponente mayor de Lyapunov | Negativo o Cero | Positivo | Positivo cercano a cero |
| Espectro de Lyapunov | Espectros en la línea cero o negativos | Espectros positivos | Espectros positivos |
| Atractor en el Espacio fase | Punto fijo | Atractor característico que pudiera ser “extraño” | Sin forma característica |

En el siguiente capítulo se aplicará la metodología de análisis no lineal que permitirá establecer el comportamiento dinámico de las series de tiempo de ozono.

CAPITULO IV

4. ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO DINÁMICO DEL OZONO

4.1. Registros de datos

Los registros correspondientes a los principales contaminantes atmosféricos, fueron proporcionados por La Secretaría del Medio Ambiente del DF. (SMADF) así como los datos meteorológicos que son medidos en las estaciones de monitoreo atmosférico de la Zona Metropolitana del Valle de México. Los registros proporcionados (en formato *.txt), son del año 1986 al año 2002; éstos corresponden a datos horarios por los 365 días del año ($24 \times 365 = 8760$ datos por año).

Por la necesidad de saber que tan consistentes o completos estaban los registros (porcentaje faltante de datos), se importaron a una hoja de cálculo; en este caso a Excel de Microsoft® versión 5.0. Ésta permitió el manejo de hasta 32,768 datos, sin embargo, el método utilizado para el relleno de los registros sólo permitió sustituir con ceros o con algún valor previamente seleccionado las celdas vacías.

4.2. Selección de las estaciones de monitoreo

Se buscó entre diversos programas estadísticos, el que nos permitiera un mejor manejo, para encontrar y definir los datos faltantes, encontrando que el Programa SPSS® en su versión 10 (Statistical Product and Service Solution® V: 10), permitía importar los datos desde Excel® y contaba con las herramientas adecuadas de relleno de las celdas vacías en los registros, necesario para el análisis a realizar del sistema dinámico; en este caso el programa SPSS® permitió rellenar las celdas vacías utilizando la interpolación en una regresión lineal entre los extremos de los datos faltantes; asimismo, este programa informó sobre el número de datos faltantes, lo cual se tomó también como un criterio, entre otros, para seleccionar las estaciones de monitoreo atmosférico para el análisis. De lo anterior, se decidió tomar los datos de los últimos 4 años, ya que en los anteriores a 1998 se encontró un porcentaje de datos faltantes mayor al 2% y en buena parte de los registros, estos datos faltantes se encontraban en bloques continuos, haciendo poco confiable el relleno de los mismos. En los registros de los datos correspondientes a los últimos cuatro años proporcionados por la SMADF, los datos faltantes

se encontraban en bloques no mayores a 5 datos, dando con esto una mayor confianza en el método de relleno de los registros.

De acuerdo a lo anterior, se trabajó con un registro de datos horarios de 4 años; $8760 \times 4 = 35,040$ datos originales que, por el programa utilizado para el relleno, se redujeron a 32,768 datos (por cada estación seleccionada, lo que hace un total de 196,608 registros manejados) de los años 1999 al 2002.

Cuadro 4.1. Estaciones seleccionadas para el estudio de la dinámica del ozono (sombreadas)

| ZONA | ESTACIÓN | CLAVÉ | TOTAL DE DATOS | DATOS SUBSTITUIDOS / PORCENTAJE | | | | | | | | | |
|----------|----------------------|-------|----------------|---------------------------------|-----|-----------------|------|-----------------|-----|------|------|------|------|
| | | | | O ₃ | | NO _x | | NO ₂ | | TMP | | WSp | |
| | | | | DAT | % | DAT | % | DAT | % | DAT | % | DAT | % |
| NOROESTE | Tacuba | TAC | 32768 | 455 | 1.3 | 1481 | 4.5 | 428 | 1.3 | 1907 | 5.8 | 1686 | 5.1 |
| | ENEP Acatlán | EAC | 32768 | 3273 | 9.9 | 5705 | 17.4 | 3204 | 9.7 | 5282 | 16.1 | 5567 | 16.9 |
| | Azcapotzalco* | AZC | | | | | | | | | | | |
| | Tlalnepantla | TLA | 32768 | 1083 | 3.3 | 4609 | 14.0 | 1133 | 3.4 | 2395 | 7.3 | 4864 | 14.8 |
| NORESTE | San Agustín | SAG | 32768 | 512 | 1.5 | 2104 | 6.4 | 635 | 1.9 | 2294 | 7.0 | 4440 | 13.5 |
| | Xalostoc | XAL | 32721 | 603 | 1.8 | 1801 | 5.5 | 720 | 2.2 | 1942 | 5.9 | 1814 | 5.5 |
| CENTRO | Lagunilla* | LAG | | | | | | | | | | | |
| | Merced | MER | 32768 | 542 | 1.6 | 2075 | 6.3 | 338 | 1.0 | 2225 | 6.7 | 2229 | 6.8 |
| | Hangares | HAN | 32768 | 895 | 2.7 | 1117 | 3.4 | 388 | 1.1 | 1283 | 3.9 | 1534 | 4.6 |
| | Benito Juárez* | BJU | | | | | | | | | | | |
| SUROESTE | Santa Ursula* | SUR | | | | | | | | | | | |
| | Pedregal | PED | 32768 | 377 | 1.1 | 1169 | 3.5 | 506 | 1.5 | 1260 | 3.8 | 1075 | 3.2 |
| | Plateros | PLA | 32768 | 549 | 1.6 | 946 | 2.8 | 441 | 1.3 | 995 | 3.0 | 1326 | 4.0 |
| SURESTE | Cerro de la estrella | CES | 32768 | 435 | 1.3 | 1073 | 3.2 | 441 | 1.3 | 1279 | 3.9 | 3197 | 9.7 |
| | UAM Iztapalapa* | UIZ | | | | | | | | | | | |
| | Taxqueña* | TAX | | | | | | | | | | | |
| | Tláhuac* | TAH | | | | | | | | | | | |

Nota: Las estaciones marcadas con un * presentaron en los registros proporcionadas datos faltantes en cuanto al ozono de más del 10%.

(TMP = temperatura; WSp = Velocidad del viento).

En el cuadro 4.1, se muestran las estaciones seleccionadas para desarrollar el presente trabajo. Cabe hacer notar que el criterio principal de selección está basado en el porcentaje de datos faltantes de los registros del Ozono como contaminante (que no sea mayor al 2%). De la misma manera, la selección se estableció de acuerdo a que estuvieran representadas las cinco zonas en las que se divide la Zona Metropolitana del Valle de México, especialmente la zona centro en donde se seleccionaron dos de las estaciones que, por su ubicación, se consideró que no deberían quedar fuera del análisis.

De acuerdo a la metodología de análisis que se manejó en el capítulo III, en éste capítulo se aplicarán las herramientas computacionales que nos permitirán aproximarnos al conocimiento

del comportamiento dinámico de la serie de tiempo del Ozono en la Zona Metropolitana del Valle de México.

4.3. Análisis

El análisis de los sistemas se iniciará construyendo los gráficos que se originan en el análisis de recurrencia visual, técnica introducida en 1987 por Eckmann, Kamphorst y Ruelle, con el propósito de investigar el tipo de comportamiento dinámico de una serie de tiempo no estacionaria e identificar la estructura en la serie de tiempo (Casdagli, 1997). En general, las series de tiempo pueden tener cuatro tipos de comportamientos (Vázquez-Coutiño et al., 2001; Vázquez-Coutiño et al., 2002): determinista (y posiblemente periódico o multiperiódico), caótico, estocástico y biótico. Esta técnica será aplicada a las series de tiempo de los registros del Ozono en las estaciones de monitoreo ambiental seleccionadas (Cuadro 4.1).

4.3.1. Gráficos de recurrencia visual

Con los gráficos de recurrencia (Koebe and Mayer-Kress, 1992), se pueden detectar patrones y cambios estructurales ocultos en los datos o ver semejanzas a través de la serie de tiempo bajo estudio. Son una herramienta para la visualización de la dinámica altamente-dimensional. Es decir, si se tiene una función $y = f(x)$ y se desea examinar su comportamiento, se traza y vs x en un gráfico normal. Pero, si es más compleja, por ejemplo $y = f(x, w, z, r)$, no hay manera de trazar todas las variables en el mismo tiempo. Aquí los gráficos de recurrencia son útiles; con estos se puede trazar y visualizar la dinámica del sistema en cualquier número de dimensiones. Sin embargo, la interpretación del diagrama no es "convencional", y requiere de un análisis cuidadoso.

Antes de construir el gráfico de recurrencia, la serie de tiempo unidimensional (secuencia de observaciones) se puede ampliar en un espacio altamente-dimensional, en el cual la dinámica del generador subyacente ocurre. Se hace usando la técnica llamada coordenada de retraso incrustada (delayed coordinate embedding) (Zbilut and Webber, 1992), que reconstruye un gráfico del espacio-fase del sistema dinámico bajo estudio de una serie de tiempo (escalar). Tan notable como parece, se ha probado que uno puede reconstruir un cuadro topológico equivalente del comportamiento multidimensional original del sistema usando la serie de tiempo de una sola variable observada (Teorema de Takens). La idea es que el efecto (desconocido) del resto de las variables está reflejado en la salida del sistema, en su señal

observable, Sin embargo, debemos mencionar que un sistema es observable si se puede determinar el estado inicial del mismo a partir de las mediciones de entradas y salidas, en un tiempo finito. No obstante, si la variable de estado seleccionada no influye en la salida, entonces no se puede observar dicha variable y entonces se dice que el sistema no es observable. Así entonces, la observabilidad investiga la posibilidad de estimar el estado del sistema a partir del conocimiento de la salida. Consideramos el sistema lineal estacionario.

$$\begin{aligned} \dot{x} &= Ax + Bu \\ y &= Cx + Du \end{aligned} \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, B \in \mathbb{R}^{n \times p}, C \in \mathbb{R}^{q \times n}, D \in \mathbb{R}^{q \times p}$$

Se dice, que esta ecuación de estado es observable si para cualquier estado inicial $x(0)$ (desconocido), existe un tiempo finito t_1 tal que el conocimiento de la entrada u y la salida y sobre el intervalo $[0, t_1]$ es suficiente para determinar en forma única el estado $x(0)$. En caso contrario el sistema es no observable.

El concepto de observabilidad es útil al resolver el problema de reconstruir señales o variables de estado no medibles a partir de variables que si son medibles en un tiempo lo menor posible (Braslavsky, 2001).

En nuestro caso, el problema de observabilidad no está en relación con la selección de una variable particular que me permita conocer el comportamiento dinámico de otra u otras variables después de un tiempo finito; más bien estamos seleccionando la variable problema (concentración de ozono) y descubriendo la dinámica subyacente, del propio ozono, mediante la aplicación de los métodos de análisis no lineal del sistema. Es precisamente aquí donde resulta de gran utilidad el teorema de Takens.

Para ampliar una señal unidimensional en un espacio fase M -dimensional, uno substituye cada observación en la señal original $x(t)$ con el vector

$$y(i) = (x(i), x(i + d), x(i + 2d), \dots, x(N + (m-1)d)), \quad (4.1)$$

Donde i es el índice de discretización del tiempo, m es la dimensión incrustada, d es el tiempo de retraso. Consecuentemente, tenemos una serie de vectores:

$$Y = \{y(1), y(2), y(3), \dots, y(N-(m-1)d)\}, \quad (4.2)$$

Donde N es la longitud de la serie original.

La idea de tal reconstrucción es capturar los estados originales del sistema en cada tiempo que se tenga una observación de la salida del sistema. Cada estado desconocido $S(t)$ en el tiempo t es aproximado por un vector de coordenadas retrasadas

$$y(i) = \{x(i), x(i-d), x(i-2d), \dots, x(i-(m-1)d)\} \quad (4.3)$$

Una vez que el sistema dinámico se reconstruye, el gráfico de recurrencia se puede utilizar para demostrar qué tan lejanos o cercanos están los vectores en el espacio reconstruido. Específicamente, el método de recurrencia visual, calcula las distancias (euclidianas) entre todos los pares de vectores y las codifica como colores. Esencialmente, el gráfico de recurrencia es una matriz color-codificada, donde cada entrada $[i][j]_{\text{ésima}}$ se calcula como la distancia entre los vectores $Y(i)$ y $Y(j)$ en la serie reconstruida. Las distancias son entonces graficadas en los colores del mapeo preestablecido y estas se exhiben como píxeles coloreados en sus lugares correspondientes. El diagrama de recurrencia es esencialmente una representación gráfica de una integral de correlación. Una importante distinción (y una ventaja de los diagramas de recurrencia) es que los diagramas, a diferencia de las integrales de correlación, preservan la dependencia de las series de tiempo, además de la dependencia espacial.

4.4. Detección de fluctuaciones de nivel por el Método de conteo de los cuadros de nivel

En el año 2004, Vázquez-Coutiño observó que, cualquier señal sea o no dependiente del tiempo puede mostrar cambios abruptos o ligeros en el nivel de fluctuaciones (o de ruido) (Fig. 4.1), demostró que los gráficos de recurrencia son una técnica que permite detectar estas fluctuaciones o cambios de nivel y que dichos gráficos se usan para revelar la no estacionariedad de una serie de tiempo. En la técnica del gráfico de recurrencia (Eckmann et al., 1987), se parte de la serie de datos dependientes del tiempo o de un parámetro t (no necesariamente el tiempo): $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$. La reconstrucción de la dinámica del espacio-fase

(posiblemente multidimensional) se hace mediante la técnica de graficar la variable $x(t)$ vs. la variable $x(t+\Delta t)$ con un retardo (o avance); partiendo de una sola x observada, gobernada por dos parámetros: la dimensión incrustada d_E y el tiempo de retardo $\tau = \Delta t$, siendo la trayectoria resultante en

$$R^d: \{y_1, y_2, \dots, y_m\}, \text{ donde } m = M - (d_E - 1)\tau \text{ y } y_k = (x_k, x_{k+\tau}, x_{k+2\tau}, \dots, x_{k+(d_E-1)\tau},$$

con $k = 1, 2, \dots, m$.

La construcción de los gráficos de recurrencia se basa en el cálculo de las distancias mutuas entre puntos de una trayectoria generada por un sistema dinámico. La distancia $D(y_i, y_j)$ se toma como la p-normal euclidiana o norma máxima, con lo cual se define la matriz de recurrencia como:

$$R(i, j) = D(y_i, y_j), \quad 1 \leq i, j \leq m$$

$$D(y_i, y_j) = \max_{1 \leq k \leq d_E} |x_{i+(k-1)\tau} - x_{j+(k-1)\tau}|$$

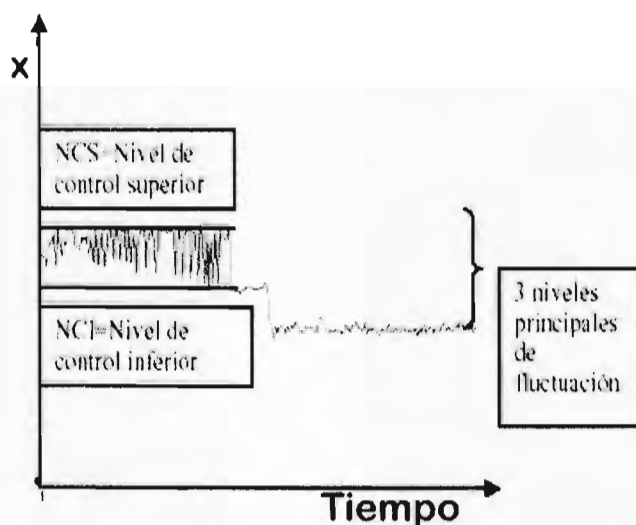


Figura 4.1. Ejemplo de gráfico de control de Shewhart para un sistema con tres niveles de fluctuación. Se muestran los límites de control superior e inferior para el primer nivel de fluctuación.

En la figura 4.1, no se puede detectar la existencia de más subniveles de fluctuación en los tres niveles mostrados. Así entonces, de acuerdo a Vázquez-Coutiño (2004), la detección de la existencia de uno o más niveles de fluctuación, tiene su respuesta en los gráficos de recurrencia (fig. 4.2), estos ayudan a detectar con un menor margen de error varios niveles y

subniveles de fluctuación, en la figura 4.2, se observa la aparición de 3 niveles de fluctuación principales y por lo menos 4 subniveles asociados al primer nivel y dos subniveles al tercer nivel.

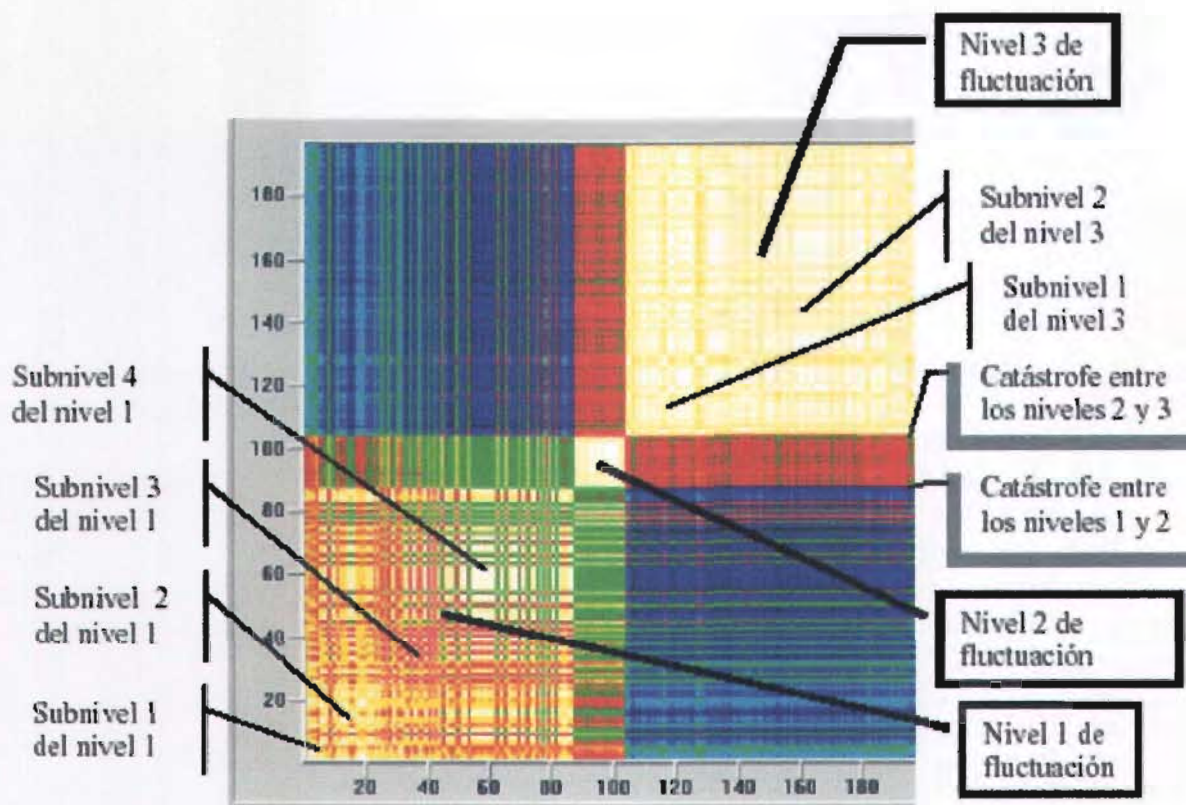


Figura 4.2. Gráfico de recurrencia del gráfico de control de la figura 4.1, en donde se pueden observar los niveles principales y los subniveles de fluctuación. A cada nivel principal mostrado en la figura 4.1, se le asocia un “cuadro de nivel” sobre la diagonal principal.

Estos cambios (o catástrofes) asociados a la señal en el tiempo, y evidenciados con la técnica de *conteo de cuadros de nivel*, permite descubrir cambios abruptos muy finos asociados a cambios en la calidad en los procesos de manufactura.

En el caso de la contaminación por ozono, observando las gráficas de las series de tiempo (Fig. 4.3), se puede observar la existencia de fluctuaciones aunque en esta representación es imposible determinar adecuadamente los niveles de estas fluctuaciones; así, si los cambios de la señal no son abruptos y el cambio de nivel de fluctuación es aparentemente suave, los

gráficos de recurrencia pueden evidenciar con un mayor detalle la existencia de los niveles de fluctuación principales y de los subniveles correspondientes a estas fluctuaciones principales.

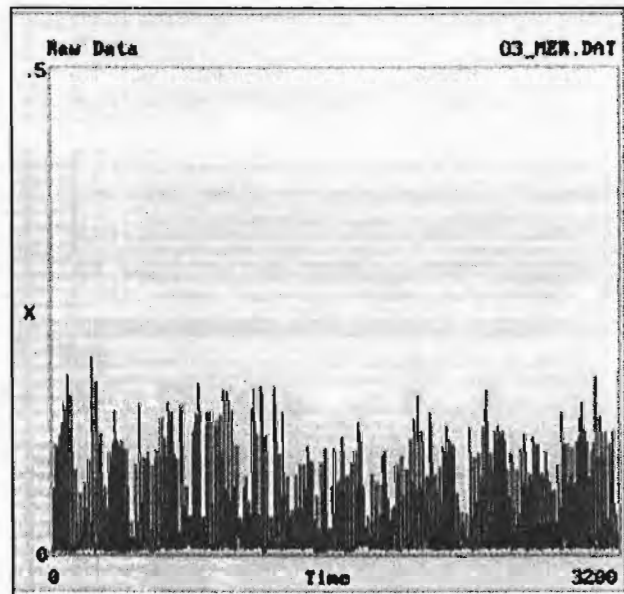


Figura 4.3. Serie de tiempo de los datos de contaminación por ozono en la estación Merced

La aplicación de ésta técnica, como una nueva propuesta en este trabajo, al análisis de las series temporales de la contaminación por ozono es factible y permite detectar los cambios de nivel de contaminación asociados a las llamadas “catástrofes” en las series de tiempo de ozono. Estas denominadas catástrofes están referidas a los cambios que sufre el nivel de producción de ozono por la influencia de los factores (múltiples) que han sido mencionados en el capítulo anterior. Estos se pueden complementar con el gráfico de espacio de estados, observando los atractores asociados a los distintos niveles de fluctuación.

De acuerdo a lo antes expuesto, inicialmente necesitaremos establecer el tiempo de retraso (*time lag*) y la dimensión incrustada (*embedding dimension*) para obtener la mejor representación del sistema dinámico de los registros de ozono obtenidos en las estaciones de monitoreo seleccionadas.

4.4.1. Tiempo de retraso y dimensión incrustada

La dimensión incrustada determina el número de las componentes en el vector reconstruido del sistema de estado. Si las series de tiempo son sin ruido, no hay problema al usar valores más altos de la dimensión incrustada, a excepción del incremento en el tiempo de cómputo. Sin embargo, si las series de tiempo contienen ruido, el ruido se amplificará y la calidad de las predicciones se deteriorará, así que es deseable fijar la dimensión incrustada tan pequeña como sea posible. Sin embargo, si la dimensión incrustada se fija demasiado baja, la dinámica subyacente del sistema no será resuelta singularmente. Uno de los métodos para determinar la dimensión incrustada mínima es el método de los vecinos falsos más cercanos. Este método puede dar una idea aproximada de que tan alta se debe utilizar la dimensión incrustada. Sin embargo, se pueden obtener, a menudo, mejores modelos basados en una dimensión incrustada diferente a la obtenida teóricamente (Zbilut and Webber, 1992).

El tiempo de retraso determina la separación de los componentes en el vector reconstruido del sistema de estado. Si el tiempo de retraso se fija bajo, los componentes correspondientes del vector pueden ser demasiado redundantes. Si el retraso se fija alto, los componentes correspondientes del vector pueden ser demasiado independientes. Uno de los métodos para determinar el valor óptimo del tiempo de retraso es la función de información mutua promedio. Sin embargo, el valor teórico del tiempo de retraso sugerido por ese método puede no ser el mejor para los propósitos de la predicción de la serie de tiempo.

4.4.2. Tiempo de retraso

La función de información mutua se puede utilizar para determinar el valor "óptimo" del tiempo de retraso para la reconstrucción del espacio de estado (Fraser and Swinney, 1986). La idea es que una buena selección del tiempo de retraso T es que dado el estado del sistema $x(t)$, éste provea de nueva información máxima con la medición a $x(t+T)$. La información mutua es la respuesta a la pregunta, "dada una medida de $x(t)$, cuántos 'lapsos de tiempo' en promedio se pueden predecir acerca de $x(t+T)$ "; este cálculo nos permite saber tantos "lapsos de tiempo" como sea posible cerca de $x(t+0) = x(t)$. Como se observa en la figura 4.4, el gráfico de $I(T)$ inicia muy arriba (dada una medida $x(t)$), Así, mientras que se incrementa T , $I(T)$ disminuye, después generalmente se eleva otra vez. Se sugiere que se utilice el valor de retraso donde $I(T)$ alcanza su primer mínimo para la reconstrucción del espacio de estado.

4.4.3. Información mutua

Del gráfico de información mutua promedio (Average Mutual Information) (Fig. 4.4) calculamos el tiempo de retraso, en este caso el cálculo se aplica a la serie de tiempo del ozono en la estación de monitoreo de Cerro de la Estrella (CES), el procedimiento se efectuó para el registro de 32,768 datos, el cálculo arroja un tiempo de retraso igual a 6.

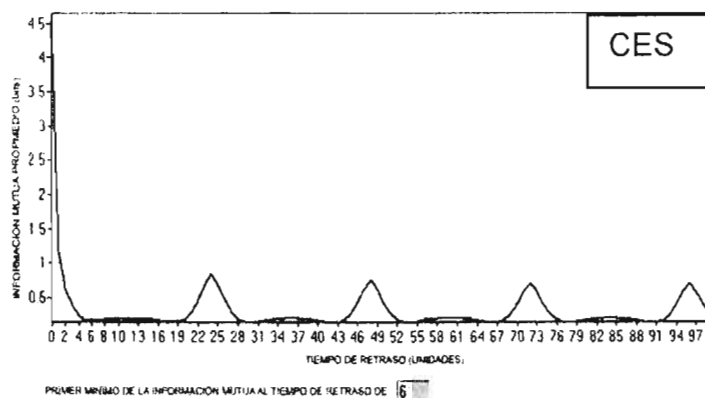


Figura 4.4. Gráfico de Información Mutua Promedio (Kononov, 2004), utilizado para calcular el tiempo de retraso.

4.4.4. Determinación de la Dimensión Incrustada

Los vecinos falsos más cercanos (FNN, por sus siglas en inglés False Nearest Neighbors) se emplean para elegir la mínima dimensión incrustada de una serie de tiempo unidimensional (Kennel, et al., 1992). Este método encuentra el vecino más cercano de cada punto en una dimensión dada, entonces efectúa una comprobación para considerar si estos puntos siguen siendo vecinos cercanos en una dimensión más alta. El porcentaje de vecinos falsos más cercanos debe tender a cero cuando se ha alcanzado la dimensión incrustada apropiada. El método de FNN requiere fijar dos valores de umbral, que se utilizan para determinar a los vecinos falsos. El método es sensible al índice de muestreo de la serie de tiempo.

En el programa utilizado “Visual Recurrence Análisis®” (VRA) (Kononov, 2004), el método de FNN se implementa con algunas modificaciones del método original de FNN. No tiene parámetros libres a fijar, es robusto en la presencia del ruido, y no es sensible al valor del muestreo. El algoritmo es como sigue:

4.4.5. Algoritmo para los vecinos falsos más cercanos

Cada vector $X = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ en la serie de tiempo encuentra a su vecino más cercano $Y = (y_1, y_2, y_3, \dots, y_n)$ en un espacio n -dimensional. Itera ambos puntos y computa $R = |x_{n+1} - y_{n+1}|$. Esta distancia R es esencialmente una distancia entre las imágenes de los vectores X e Y . Se puede pensar también en y_{n+1} como predictor para x_{n+1} . De lo anterior, R es el error de la predicción. La idea es que cuando el atractor se desdobra totalmente en n dimensiones, la distancia R entre los $(n+1)$ componentes de los vectores X e Y serán pequeñas. Para detectar si el vecino más cercano encontrado es falso, comparamos R (el error de la predicción) con los errores que habrían sido hechos por un predictor trivial. Si el error hecho por el predictor trivial es menor que R , se registra al vecino más cercano como "falso". El predictor trivial utiliza simplemente a x_n como predictor de x_{n+1} . Así:

$$\text{si } |x_{n+1} - y_{n+1}| = |x_{n+1} - x_n|, \quad (4.4)$$

El vecino más cercano es etiquetado como "falso".

Del gráfico de vecinos falsos más cercanos global (Global False Nearest Neighbors) (Fig. 4.5) obtenemos la "dimensión incrustada global óptima", en este caso el método fue aplicado a los registros de la serie de tiempo del ozono de la estación de monitoreo del Cerro de la Estrella (CES), el método se aplicó a 32,768 registros, mostrando una dimensión incrustada global óptima con un valor de 6 correspondiente a un 49.18% de vecinos falsos más cercanos.

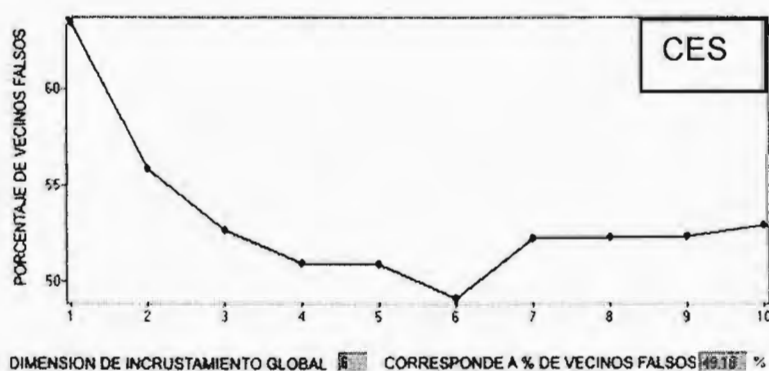


Figura 4.5. Gráfico de "Global False Nearest Neighbors" (Kononov, 2004) utilizado para el cálculo de la Dimensión de Incrustamiento Global Óptima.

Dados los resultados, de tiempo de retraso y dimensión de incrustamiento, estos fueron aplicados para establecer las condiciones en las que se construyeron los gráficos de recurrencia visual.

4.5. Establecimiento del gráfico de recurrencia Visual

Una vez que se calculan los parámetros necesarios (tiempo de retraso y dimensión incrustada global óptima) se procede a construir el diagrama de recurrencia visual que nos permitirá conocer el comportamiento dinámico de la serie para tratar de identificar cualitativamente la estructura en la serie de tiempo y detectar gráficamente los patrones y cambios estructurales ocultos en los datos o ver semejanzas en los patrones.

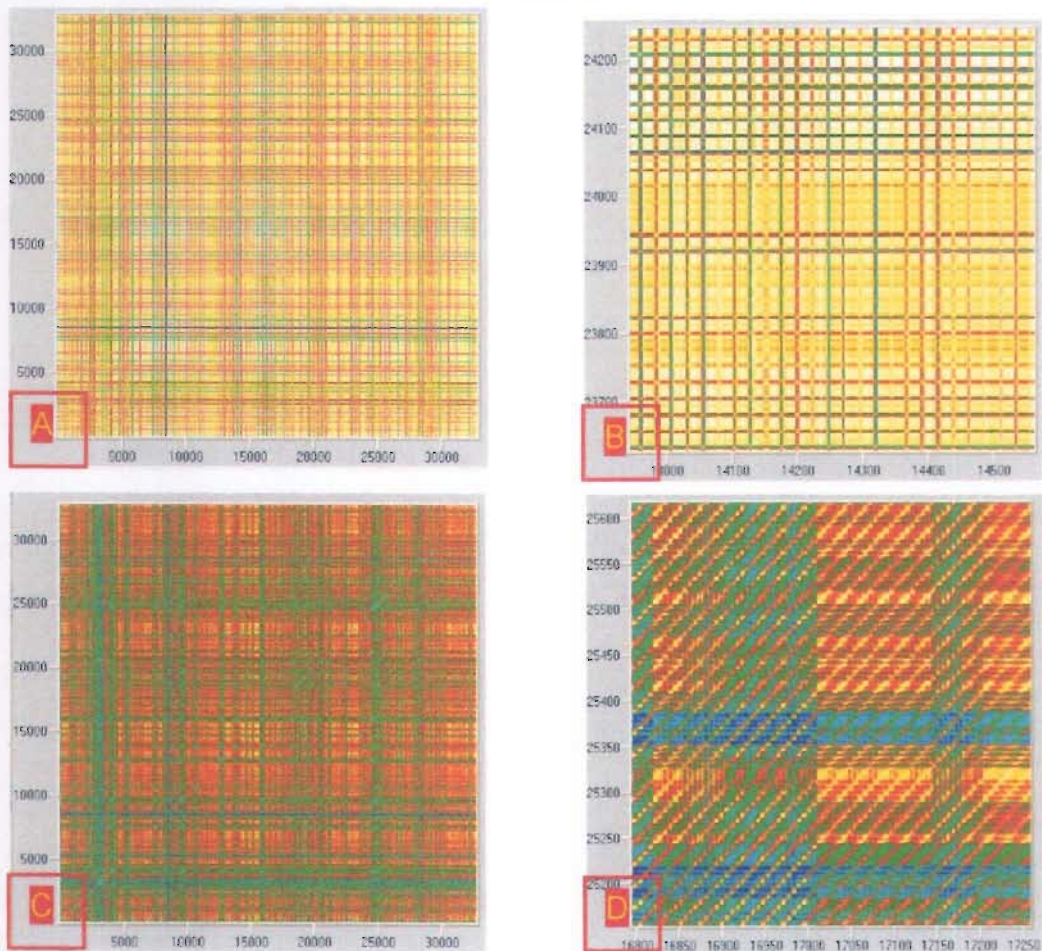


Figura 4.6. Gráficos de recurrencia visual para ozono, trazados con los valores de dimensión incrustada de 1 y tiempo de retraso de 0, dados inicialmente por el programa. (A): directa; (B): con acercamiento; y (C): directo; (D): con acercamiento, se trazaron con los valores de 6 para la dimensión incrustada global óptima; y valor de 6 para el tiempo de retraso, obtenidos por el cálculo de vecinos falsos mas cercanos global (Global False Nearest Neighbors) e información mutua promedio (Average Mutual Information), respectivamente .

La Figura 4.6. A, B, C, D, muestra los gráficos de recurrencia visual obtenidos con los valores de dimensión incrustada igual a 1 y tiempo de retraso de 0 que por diseño establece el programa; (Figura 4.6A directa y B con acercamiento, respectivamente); la Figura 4.6C (directa) y D (con acercamiento)) se establecieron utilizando los valores encontrados para la dimensión incrustada óptima y el tiempo de retraso: dimensión incrustada de 6 y tiempo de retraso de 6; utilizando la distancia euclidiana y límites y mapeo locales, para un total de 32,768 datos registrados.

Los gráficos del análisis de recurrencia visual (Fig. 4.6 A, B, C, D) no muestran, aparentemente, estructura alguna lo que correspondería a una señal aleatoria; así mismo, la distribución de colores es uniforme (constante y regular) lo que corroboraría este tipo de comportamiento.

4.5.1. Manejo de los parámetros de dimensión incrustada y tiempo de retraso

Dados que los resultados del análisis recursivo, aplicando los valores de tiempo de retraso y dimensión de incrustamiento calculados, no fueron los esperados para evidenciar el comportamiento “oculto” de la serie de tiempo y tomando en cuenta lo que la teoría señala sobre los parámetros de la dimensión incrustada y el tiempo de retraso, la cual establece que los métodos de vecinos falsos más cercanos y el de la información mutua sólo dan una idea, aproximada, de que tan alta se debe utilizar la dimensión incrustada, pero que, pueden lograrse mejores modelos basados en una dimensión incrustada diferente a la obtenida teóricamente y que el valor calculado del tiempo de retraso puede no ser el mejor para los propósitos de la predicción de la serie de tiempo. Por lo anterior, se buscó directamente en el gráfico de recurrencia visual con que valores, de los parámetros, se lograba distinguir un señal más estructurada, lo que nos permitiría suponer que existe en las series de tiempo del ozono, aunque oculto, una conducta que se acerque hacia el comportamiento determinista; para esto, se tomó como un buen ejemplo de determinismo, el gráfico de recurrencia visual de la función seno para comparar su estructura con la obtenida con los registros de ozono. Dicha comparación se muestra en la Figura 4.7, cabe señalar que en el caso del gráfico de ozono se trata de un acercamiento (zoom), en el cual se distingue la estructura.

Los parámetros de dimensión incrustada global óptima y tiempo de retraso, encontrados para establecer el comportamiento de la serie de tiempo del ozono son de 36 y 12, respectivamente.

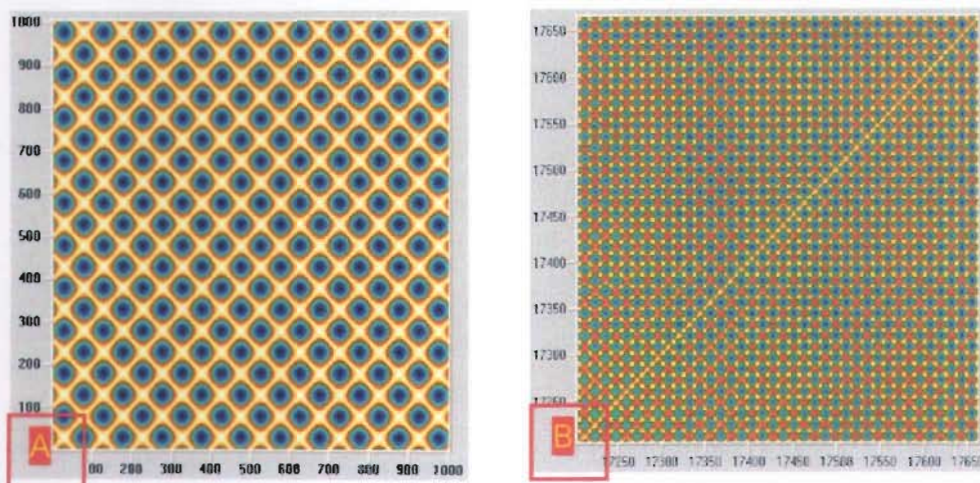


Figura 4.7. Gráficos de Recurrencia visual. (A): representa al seno con una Dimensión incrustada de 1 y un Tiempo de Retraso de 0; (B): serie de ozono para la estación Cerro de la estrella con una dimensión incrustada de 36 y un Tiempo de Retraso de 12, en representación Euclidiana y límites locales.

Como se puede observar en la Figura 4.7, el diagrama de recurrencia visual, para el caso de la función seno (Figura 4.7A), muestra una estructura la cual puede decirse que es perfecta, los colores muestran una distribución uniforme (constantes y regulares), indicando con estas características que se trata de una serie con comportamiento determinista; al observar el diagrama de recurrencia visual para el caso de la serie de ozono, podemos observar que también muestra una estructura, no tan definida como en el caso de la función seno, pero que si nos sugiere la presencia de un comportamiento dinámico que exhibe periodicidad y se acerca al determinismo; la distribución de colores presenta una uniformidad no tan perfecta como en el caso de la función seno; sin embargo, se encuentra presente un desplazamiento constante y regular de los colores, lo que nos permite sugerir que el comportamiento dinámico del ozono, se acerca más a un comportamiento determinista que a un comportamiento aleatorio o caótico.

La diferencia entre ambos diagramas (función seno con comportamiento determinista y ozono con un comportamiento que se acerca al determinismo) se puede atribuir, entre otras razones, a que en el caso de la función seno es conocida la periodicidad, mientras que en el caso del ozono se trata de una serie de tiempo “real”, la cual consideramos que está afectada por “ruido” que impide observar, en la serie original, un comportamiento determinista, el cual solo

es patente después de que esta serie es graficada utilizando los parámetros de dimensión incrustada y el tiempo de retraso adecuados.

4.5.2. Validación del método de recurrencia visual

Para mostrar la importancia que los parámetros, tiempo de retraso y dimensión incrustada, tienen al momento de buscar el comportamiento determinista, en la Figura 4.8, A, B, C, D, se muestran los gráficos de recurrencia visual correspondientes a la serie de la función seno con ruido (Fig. 4.8A); seno con ruido manejando la dimensión incrustada a un valor de 13, manteniendo el tiempo de retraso en 1 (Fig. 4.8B); la serie de “ruido blanco” (Fig. 4.8C) y la serie de “ruido blanco”, manejando la dimensión incrustada en 36 y el tiempo de retraso en 12 (Fig. 4.8D).

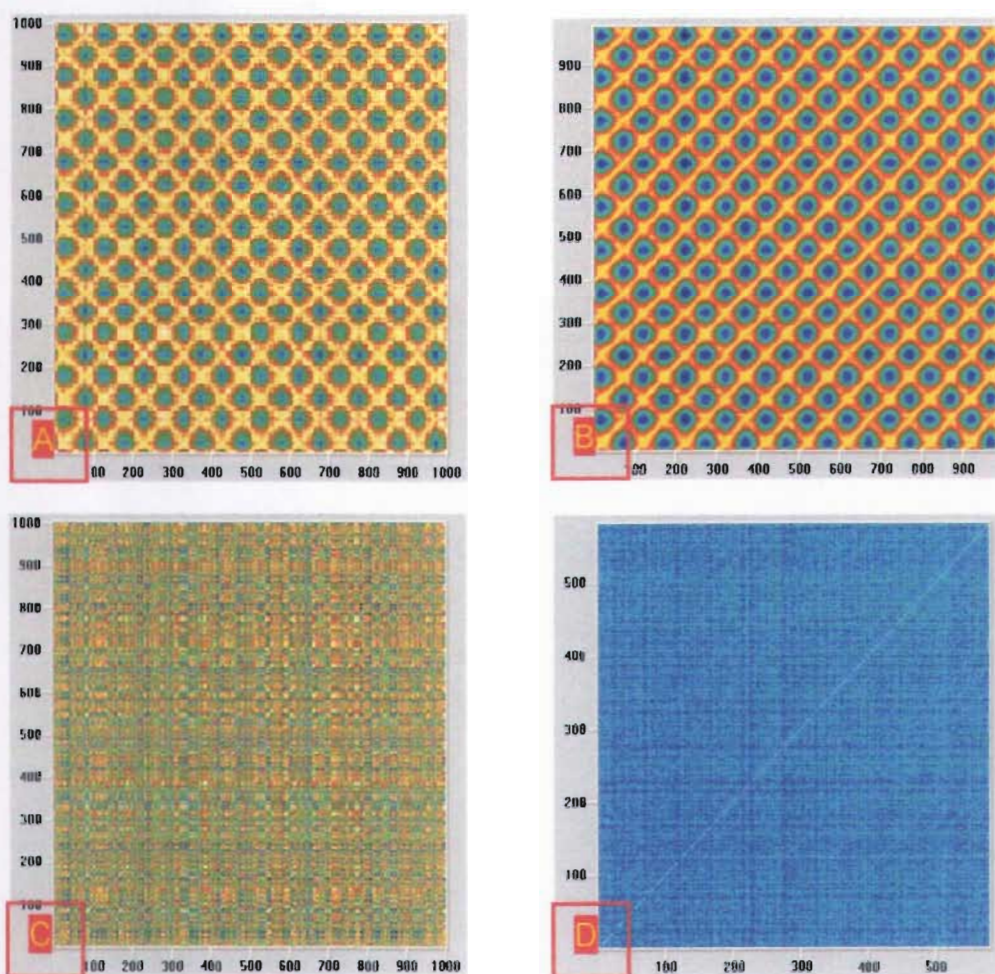


Figura 4.8. Gráficos de recurrencia visual correspondientes a (A): serie de la función seno con ruido; (B): seno con ruido y manejando la dimensión incrustada a un valor de 13 manteniendo el tiempo de retraso en 1; (C): serie para “ruido blanco”; (D): serie de “ruido blanco” manejando la dimensión incrustada en 36 y el tiempo de retraso en 12.

En la Figura 4.8, se puede observar que el manejo adecuado de de estos parámetros, permiten extraer o destacar el comportamiento “oculto” de las series, tal como se demuestra en el caso de la función seno con ruido (Fig. 4.8A) en la cual al manejar la dimensión incrustada (en este caso con un valor de 13), permite acercarse de manera notoria, aunque no total, al comportamiento de la serie original (Fig. 4.8B vs Fig. 4.7A); demostrando que el manejo de estos parámetros es de una gran utilidad cuando se analizan series que inicialmente aparecen con un comportamiento más parecido a uno aleatorio. Sin embargo, cuando la serie es totalmente aleatoria, como es el caso del “ruido blanco” (Fig. 4.8C), no sirve de nada el manejo de estos parámetros ya que, bajo el comportamiento de una serie aleatoria, no se encontrará nunca un comportamiento diferente. Esto nos permite señalar que el método de análisis de recurrencia visual es confiable para la demostración del comportamiento dinámico que subyace en una serie de tiempo “real”; asimismo, se demuestra que este método, no permite aparentar o encontrar resultados engañosos por más que se pretenda manejar los parámetros, que el método y el programa permiten, aunque estos estén fuera de contexto.

4.6. Introducción del método de conteo de los cuadros de nivel en la detección de fluctuaciones

Una vez establecida la confiabilidad del análisis de recurrencia visual (VRA por sus siglas en inglés), se introducirá la nueva técnica de análisis visual basada en el VRA pero observando los cuadros de nivel o fluctuaciones que presentan estos diagramas y que no son observables con otras técnicas (Beristain y Vázquez-Coutiño, 2005).

Observando la figura 4.9, en donde se muestra el gráfico de recurrencia visual del ozono para los 32,768 datos originales; construido con los valores de tiempo de retraso y dimensión de incrustamiento con los cuales se encontró el comportamiento determinista, una dimensión de incrustamiento con un valor de 36 y un valor de 12 para el tiempo de retraso, con los que se demostró el comportamiento determinista (ver figura 4.7B, en donde se muestra un acercamiento de la gráfica 4.9). En la gráfica podemos distinguir una serie de niveles de fluctuación principales (3 al menos) bien definidos y resaltados por las bandas de color amarillo.

Aunque la dinámica que prevalece en la serie de tiempo completa (cuatro años) muestra ser periódica (tal como se muestra en el acercamiento de la figura 4.7B) e indica aparentemente

que las perturbaciones externas a la dinámica fotoquímica del ozono no influyen de manera preponderante en el tipo de comportamiento dinámico, sin embargo un estudio basado en la separación de la serie de tiempo por niveles de fluctuación a través de un método de conteo de cuadros de nivel, permitirá detectar intervalos de tiempo en la serie que pudieran representar algún cambio en el comportamiento dinámico.

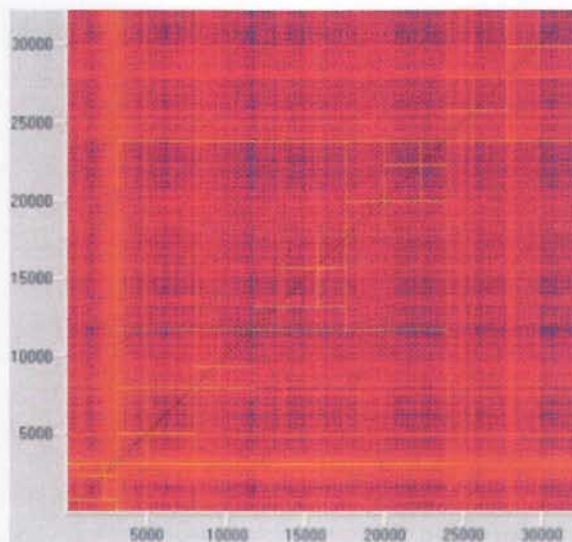


Figura 4.9. Grafica de recurrencia visual del ozono mostrando los niveles de fluctuación.

En nuestro caso, sobre la diagonal principal se pueden observar tres niveles de fluctuación principales (aproximadamente entre los valores 0 – 2500, 2500 – 24000 y 24000 -36000) y dentro de estos se presentan varios subniveles más. Estos subniveles podrían representar una serie de catástrofes en el sentido matemático, lo que pudiera significar un cambio brusco en el comportamiento dinámico del índice de ozono; así un estudio más fino y teniendo un control preciso sobre las épocas de muestreo (fechas) de los registros de ozono, nos permitiría determinar las causas por las cuales se presentan estas “catástrofes” las que pueden estar representadas por alteraciones en el comportamiento dinámico del ozono debidas a: cambios de tecnología; cambios de política ambiental; cambios en la intensidad del tráfico, el cual resultaría de particular importancia; métodos de detección, manuales o automatizados, etc.

En la figura 4.10, se muestran algunos gráficos resultantes del análisis de recurrencia visual del comportamiento dinámico del ozono, tomando como base la separación por niveles de fluctuación mostrados en la figura 4.9.

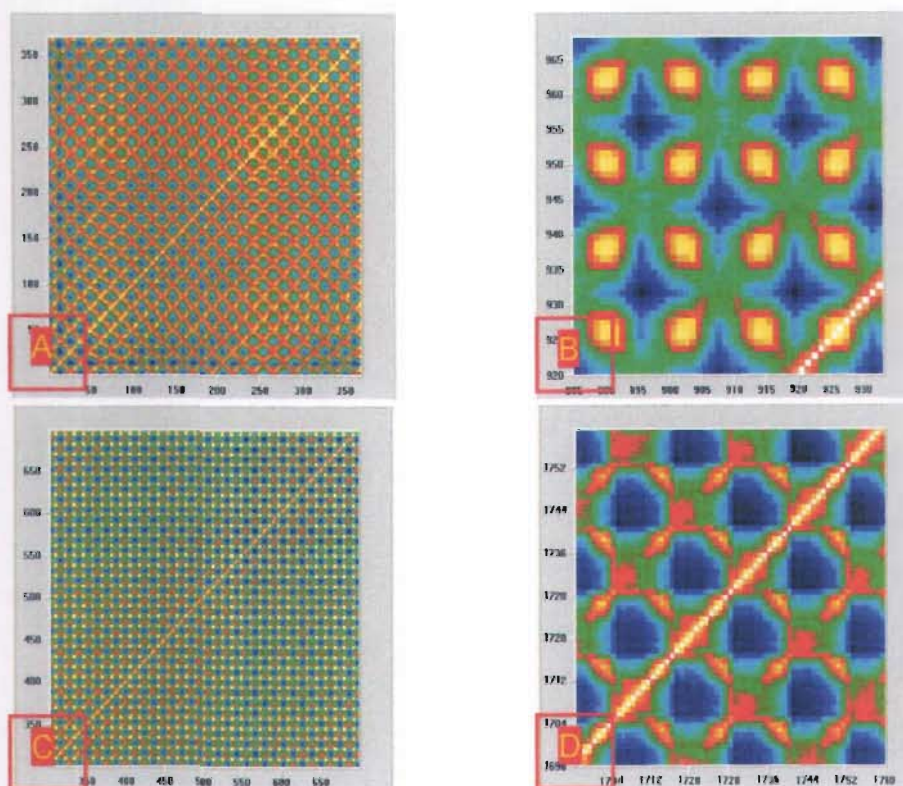


Figura 4.10. Gráficos de recurrencia visual correspondientes a algunos de los niveles de fluctuación del comportamiento dinámico de ozono (tomados de la figura 4.9). (A): nivel 2500 a 3000; (B): nivel 5000 a 7500; (C): nivel 7500 a 9000; (D): nivel 18,000 a 27,000.

Es posible observar que el comportamiento dinámico de la serie separada por niveles de fluctuación presenta pequeñas diferencias, sin embargo, en ningún nivel de fluctuación se muestra comportamiento aleatorio o estocástico. En prácticamente todos los niveles de fluctuación se observa una estructura típica de comportamiento periódico o multiperiodico. Aunque estos pequeños cambios, que se observan en la estructura, permiten establecer que si existen épocas en las cuales, fundamentalmente la intensidad del índice de ozono se ve afectado, no así la dinámica subyacente del sistema. Este aumento en la intensidad del índice de ozono es atribuible a la presencia de sus precursores químicos, como son los componentes del nitrógeno (ver figura 4.20, más adelante), sin embargo queda de manifiesto que la periodicidad en el comportamiento no cambia, solo cambia la intensidad debido al fenómeno fotoquímico (ver figura 4.19, más adelante).

Cabría aquí entonces, mostrar de manera concisa el análisis del comportamiento dinámico de los precursores directos del ozono, como son los NO_x (moléculas que se producen fundamentalmente debido a la quema de los combustibles fósiles) y tratar de evidenciar si se

trata de un comportamiento similar al del ozono a través de su gráfico de recurrencia visual y si presenta alguna frecuencia dominante a través del análisis de Fourier.

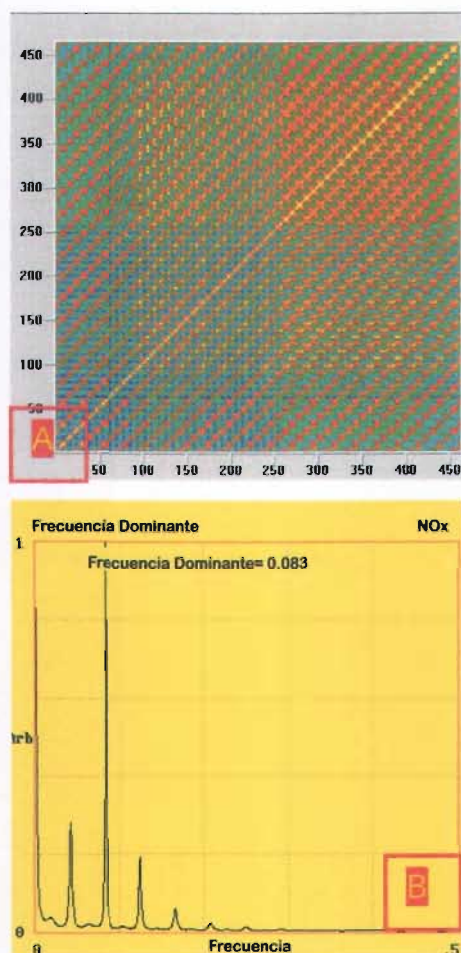


Figura 4.11. Gráficas correspondientes al comportamiento dinámico de los NOx. (A): Gráfico de recurrencia visual; (B): Frecuencia dominante.

Se puede observar en el gráfico de recurrencia de los NOx (fig. 4.11A), que a través de la diagonal principal se presentan, de manera evidente varios niveles de fluctuación los cuales se deben atribuir a cambios en el comportamiento dinámico, se puede observar que se pasa de un comportamiento multiperiodico a otro con diferente tipo de multiperiodicidad. Este gráfico de recurrencia esta en correspondencia con el de la figura 4.10A que corresponde al ozono en la misma época, esto nos induce a pensar que mientras el ozono se comporta de manera determinista, esto de acuerdo a los resultados del análisis de recurrencia y que posteriormente se corroboran con otros de los métodos de análisis no lineal aplicados, el comportamiento,

también determinista, de los NO_x pasa de un tipo de comportamiento periódico a otro con diferente tipo de multiperiodicidad. De hecho, en ningún de estos estados se observa un comportamiento aleatorio.

En el caso que nos ocupa, el de la serie de tiempo de los NO_x, la aparición de las “catástrofes” asociadas a los cuadros de nivel podría ser aleatoria (lo cual tendría que ser confirmado con un análisis más profundo). Sin embargo, el comportamiento dinámico de la serie de los NO_x, dentro de cada cuadro de nivel de fluctuación, es periódico. Las fluctuaciones asociadas a la aparición de las catástrofes entre los cuadros de nivel pueden ser atribuidas, fundamentalmente, al cambio en la intensidad de las fuentes de emisión (esencialmente, el tránsito de todo tipo de automotores) la que cambia en forma ininterrumpida en la ZMVM.

Estas moléculas, siendo precursoras del ozono (como se muestra más adelante en la figura 4.20) disminuyen su presencia cuando son requeridas para la formación del mencionado contaminante, cuya producción esta fuertemente ligada a la actividad fotoquímica, tal como se muestra en la figura 4.19.

En el caso de la frecuencia dominante de los NO_x (figura 4.11B), tenemos un valor de frecuencia de 0.0825, lo que nos representa aproximadamente 12 horas. Comparando la producción de ozono (fig. 4.20), ésta muestra como tendencia que, al aumentar la producción de NO_x y con el aumento de la temperatura (que en este caso relacionamos con el fenómeno fotoquímico), la intensidad de la contaminación por ozono va en aumento. Sin embargo, como se muestra más adelante, la periodicidad en el comportamiento dinámico del ozono es dependiente de los precursores y se mantiene en un periodo de 24 horas, independientemente de la dinámica de otros sistemas dinámicos asociados (velocidad del viento, etc.). La intensidad de la contaminación por ozono, solo se debe atribuir a la reacción del oxígeno molecular con los precursores del ozono y fundamentalmente al fenómeno fotoquímico asociado a los períodos de mayor intensidad solar (ver más adelante, figura 4.17).

4.7. Otros métodos para el análisis del comportamiento dinámico del ozono

Una vez establecida la validez del método para encontrar el comportamiento dinámico subyacente en una serie de tiempo y aun cuando, parecería satisfactorio que a través de la técnica del VRA y la del método de *conteo de cuadros de nivel*, hemos demostrado la periodicidad de las series de tiempo del ozono, consideramos necesario continuar la aplicación

de las otras herramientas de análisis no lineal de los sistemas dinámicos que nos permitan comprobar de manera más fehaciente el comportamiento dinámico del ozono en la Zona Metropolitana del Valle de México. El análisis se continuará efectuando sobre los datos de la estación de monitoreo atmosférico del Cerro de la Estrella (CES) y en los casos que así se haga necesario, se compararán con datos conocidos de series deterministas (función seno) y cuando así corresponda con datos de series de comportamiento aleatorio (ruido blanco).

Finalmente, llegado el momento y una vez demostrada la validez de la metodología de análisis para encontrar el comportamiento dinámico de las series de tiempo, está será aplicada a todas las estaciones de monitoreo atmosférico seleccionadas de la red que se encuentra en la Zona Metropolitana del Valle de México y así, tratar de establecer de manera general cuál es el comportamiento dinámico global en toda la zona (ZMVM).

4.7.1. Entropía espacio temporal

La entropía espacio -temporal mide la “estructuración” de la imagen en el dominio del espacio y el tiempo. Escencialmente, compara la distribución global de colores sobre el gráfico de recurrencia completo con la distribución de colores sobre cada línea diagonal del mismo gráfico de recurrencia. Cuantas más altas son las diferencias combinadas entre la distribución global y las distribuciones sobre las líneas diagonales individuales, más estructurada es la imagen. En términos físicos, esta cantidad compara la distribución de distancias entre todos los pares de vectores en el espacio de estado reconstruido con la de distancias entre diversas órbitas que se desarrollan en el tiempo. El resultado se normaliza y se presenta como porcentaje de la entropía "máxima" (la que daría máxima aleatoriedad); es decir, la entropía del 100% significa la ausencia de cualquier estructura (distribución uniforme de colores, de aleatoriedad pura), mientras que la entropía del 0% implica la estructura "perfecta" (patrones distintos del color, "Estructuración perfecta" y predictibilidad). Así, los siguientes rangos de la entropía espacio-temporal (Cuadro 4.2) se esperan para las diversas señales:

Cuadro 4.2. Rangos de la Entropía Espacio – Temporal para las diversas señales

| Señal | Entropía Espacio-Temporal |
|-----------|---------------------------|
| Periódica | Cercana a 0 % |
| Caótica | 0 100 % |
| Aleatoria | Cercana a 100 % |

En la Figura 4.12 A, B, C, se muestran los resultados del análisis de la entropía espacio – temporal para los datos correspondientes a la función seno, representativa de una señal periódica, función seno con ruido y, seno con ruido manipulando los parámetros de dimensión incrustada y el tiempo de retraso.

La figura 4.12, muestra que la entropía espacio - temporal para el caso de un sistema periódico como es la función seno (fig. 4.12A) presenta el valor de 0%, tal como se establece para esta clase de sistemas y de acuerdo a la estructuración que presenta en el gráfico de recurrencia; el gráfico del seno con ruido (Fig. 4.12B), a pesar de ser un sistema que de antemano se conoce que tiene un comportamiento periódico, el ruido que se le ha adicionado hace que muestre una entropía espacio-temporal calculada de 43%, muy superior al 0% que sería la esperada para este sistema, aunque el Gráfico de Recurrencia visual nos permite observar que se trata de un sistema que tiende a la periodicidad. Nuevamente, el manejo del parámetro de la dimensión incrustada, muestra que el sistema es periódico al obtenerse un valor de 0% para la entropía espacio-temporal (Fig. 4.12C) después de cambiar el parámetro de la dimensión incrustada a 23, manteniendo el tiempo de retraso en 1.

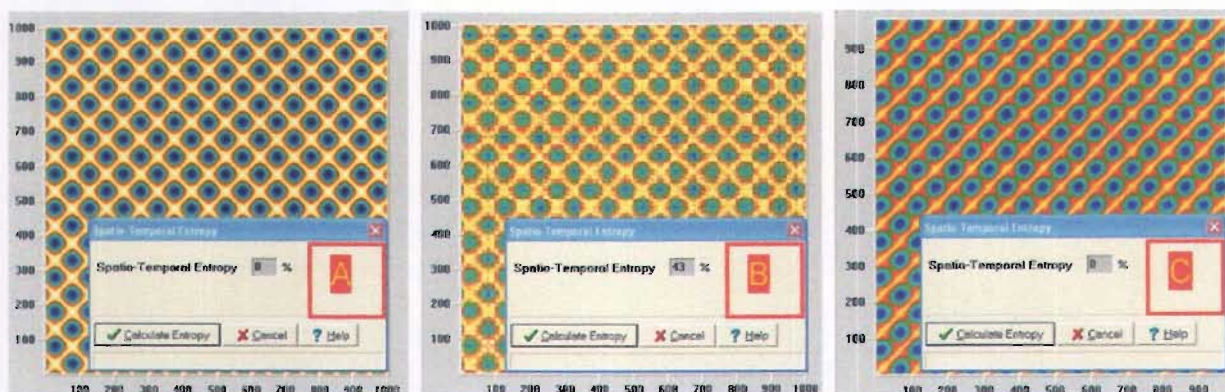


Figura 4.12. Representación del grafico de recurrencia de la función seno en donde se muestra el cálculo de la entropía espacio – temporal; (A): Función seno; (B): Función seno con ruido; (C): Función seno manejando los parámetros de dimensión incrustada y tiempo de retraso.

A continuación, y una vez que se ha demostrado que el cálculo de la entropía espacio – temporal nos permite revelar el tipo de comportamiento que presenta un sistema dinámico, aplicaremos la metodología a los registros del ozono (Estación de monitoreo CES), estableciendo los parámetros de dimensión incrustada en 36 y de tiempo de retraso en 12 que fueron los que nos permitieron encontrar el comportamiento periódico de nuestro sistema

dinámico y los mostraremos junto con el cálculo para los datos de “ruido blanco”, a los cuales se les aplicó los mismos parámetros de dimensión incrustada de 36 y tiempo de retraso de 12 (Figura 4.13, A, B).

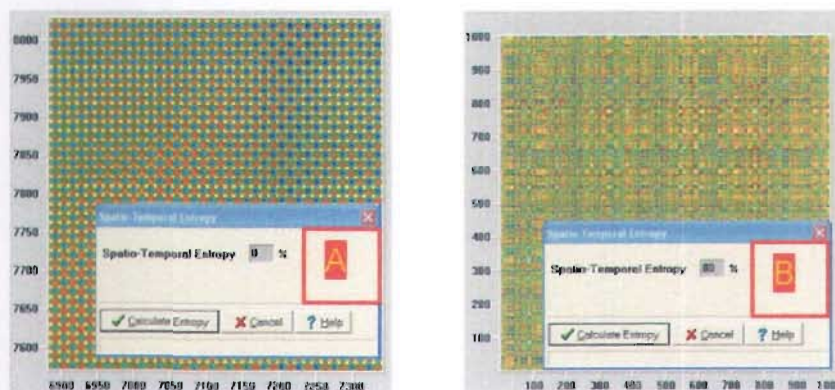


Figura 4.13. Representación del gráfico de recurrencia visual para los datos de, (A): ozono; y (B): “ruido blanco” en los que se muestra el valor de la entropía espacio – temporal calculada.

La Figura 4.13A, muestra que, para el caso de los datos de ozono, se corrobora a través del cálculo de la entropía espacio – temporal, con un valor calculado de 0%, que la dinámica de este sistema presenta un comportamiento periódico, tal como se había establecido al revisar el gráfico de recurrencia visual; en el caso del sistema formado por los datos de “ruido blanco”, se observa que el valor calculado de la entropía espacio – temporal es del 80%, a pesar del manejo de los parámetros de la dimensión incrustada (36) y del tiempo de retraso (12), lo que se interpreta, como era de esperarse, que el sistema es aleatorio.

Estos resultados del cálculo de la entropía espacio – temporal, muestran que el método tiende a ser confiable al comparar los resultados obtenidos para datos de sistemas periódicos (función seno y seno con ruido manejando los parámetros de dimensión incrustada y tiempo de retraso adecuados), así como para el caso de los datos de “ruido blanco”; de esta manera el resultado del cálculo, para el caso de los registros de ozono, se puede considerar como una prueba más de que la dinámica de este sistema es el de un comportamiento periódico. En todos los casos, los resultados del cálculo de la entropía están de acuerdo a lo que establece el método aplicado.

4.7.2. Frecuencias Dominantes. El análisis de Fourier tiene por objeto buscar las frecuencias dominantes de una señal aparentemente periódica. Proporciona una amplia información y permite el conocimiento de las propiedades dinámicas del sistema. Otra de sus aplicaciones es discriminar sobre la existencia o no de caos, aunque para algunos autores como Schouten, y Van den Bleek (1992) no sea un indicador claro y en cualquier caso siempre subjetivo y cualitativo, en el sentido de que una señal con muchas frecuencias, pero sin banda continua indicaría caos, pero en la práctica el paso de “banda continua” a “no continua” no es en absoluto claro y el límite entre ambas tiene bastante de subjetivo. No obstante, algunos autores (Rañada, 1994; Solé y Manrubia, 1993) recomiendan esta metodología cuando se sospecha la existencia de periodicidad o caos. El análisis se realiza con base en el espectro de Fourier de la señal (representación gráfica de la amplitud frente a las frecuencias): Un sistema que presente unas pocas frecuencias, claramente dominantes es indicativo de una fuerte componente periódica o pseudoperiódica en su comportamiento, mientras que muchas frecuencias diferentes pueden indicar caos o al menos aleatoriedad.

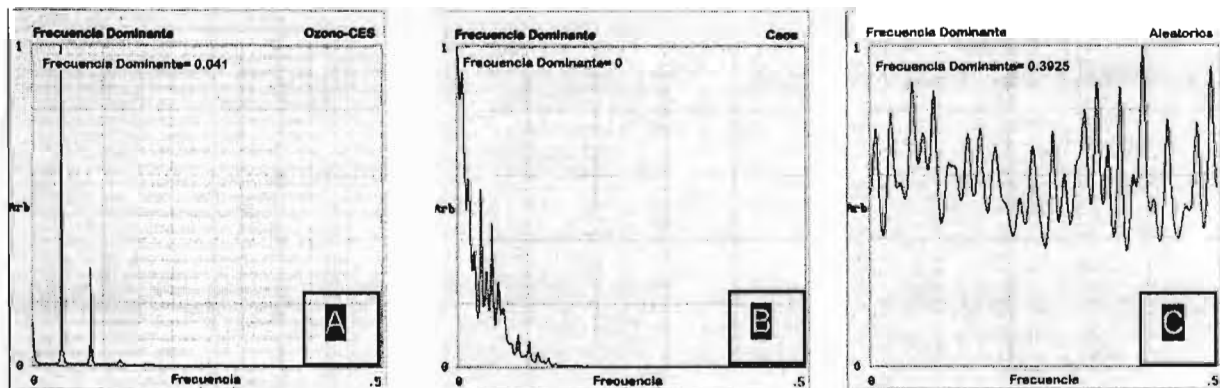


Figura 4.14. Frecuencias dominantes. (A): Datos de ozono en la estación Cerro de la Estrella; (B): Datos caóticos; (C): Datos aleatorios.

La aplicación de la “Transformación Rápida de Fourier” (FFT por sus siglas en inglés); tiene la ventaja, respecto los métodos convencionales, que sin pérdida de rigor en el análisis, permite su cálculo con muchas menos operaciones, lo que se traduce en una mayor facilidad de implementación del algoritmo y una mayor rapidez en la obtención del resultado.

En la figura 4.14A, se muestra el comportamiento del ozono comparado con datos caóticos (Fig. 4.14B) y datos aleatorios (Fig. 4.14C). Se observa en el espectro de frecuencia

dominante del ozono (Fig. 4.14 A) un valor de 0.041 hr^{-1} que corresponde a 24.39 horas. Asimismo, el espectro contiene un pico perfectamente marcado seguido de un segundo pico armónico en 0.082 hr^{-1} , con un valor de la inversa de aproximadamente 12 horas), lo que demuestra el comportamiento periódico con ciclos de 24 horas. Comparando con la frecuencia dominante para datos caóticos (Fig.4.14 B), se tiene un valor de la frecuencia dominante de cero y finalmente, en el caso de datos aleatorios (Fig. 4.14C), el espectro muestra una serie de picos de espectro amplio y azaroso que corresponden a un típico comportamiento aleatorio.

4.7.3. Dimensión de correlación

La figura 4.15, muestra los gráficos con los valores respectivos de la dimensión de correlación. Mientras que la dimensión incrustada aumenta, la dimensión de correlación debe aumentar, eventualmente se saturará en el valor correcto. El algoritmo calcula la dimensión incrustada entre 1 y 10. Una dimensión de correlación mayor o cercana a cinco implica esencialmente datos aleatorios.

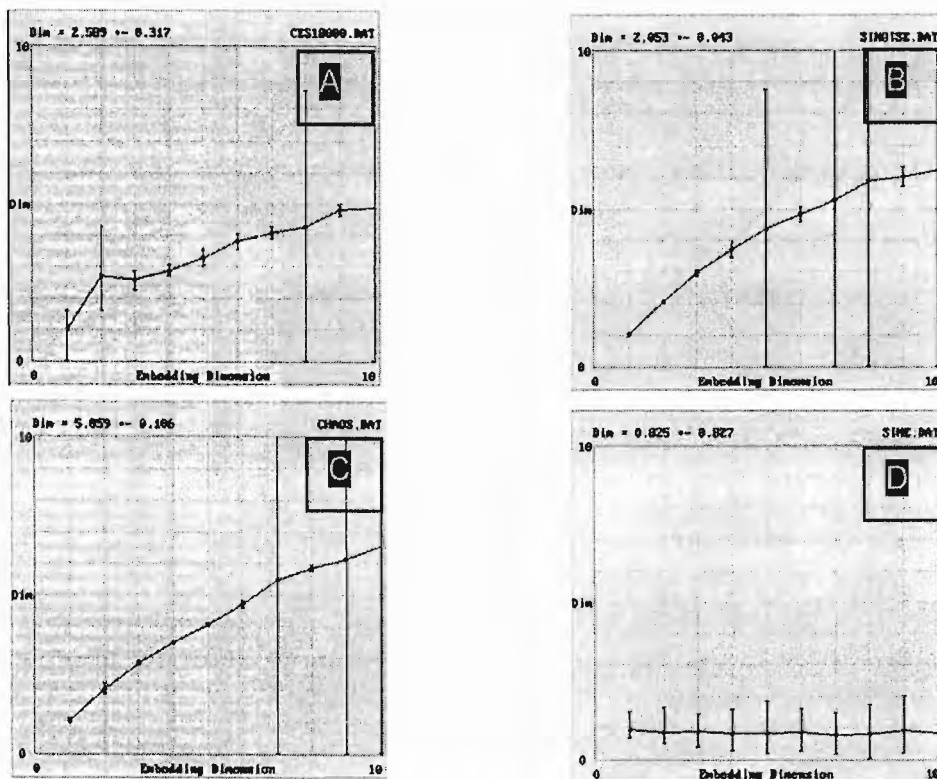


Figura 4.15. Dimensión de correlación. (A): Ozono; (B): Seno con ruido; (C): Caos; (D): Seno

Los valores correspondientes al ozono considerando que se encuentran combinados con ruido (Fig. 4.15 A) y al seno con ruido (Fig. 4.15B), se pueden comparar entre si, observando que tienden a valores de la dimensión de correlación que corresponden a un comportamiento periódico (2.51 y 2.05, respectivamente). El valor de la dimensión de correlación para el caso del seno (Fig. 4.15D) es prácticamente cero, lo que corresponde a un comportamiento totalmente periódico; finalmente, en el caso de los valores caóticos (Fig. 4.15C) el valor de la dimensión de correlación es mayor a cinco (5.06) correspondiente al comportamiento de este tipo de series. El valor de la dimensión de correlación para el caso de los datos aleatorios superó el valor de 5, esto corrobora que el valor de la dimensión de correlación es un parámetro que nos permite distinguir el comportamiento dinámico de las series de tiempo. Asimismo la comparación entre los valores de la serie de ozono con los valores de una serie totalmente periódica a la que se le ha añadido un elemento de ruido (seno con ruido) permite distinguir que el comportamiento dinámico del ozono se acerca a la periodicidad, esto aunado a los resultados encontrados en los análisis antes realizados.

4.7.4. Entropía de Kolmogorov (K)

Como se había mencionado en el capítulo anterior, Es un parámetro que permite determinar el contenido y ganancia de información en un sistema determinado. En sistemas absolutamente aleatorios se pierde toda la información, la entropía de Kolmogorov tiende a infinito. En sistemas caóticos toma valores altos pero finitos.

Las propiedades del sistema condicionan el valor de K de la siguiente forma:

- Si el sistema es regular, $K = 0$, no se pierde información.
- Si es aleatorio, $K \rightarrow \infty$
- Si es caótico, $0 < K < \infty$

La figura 4.16 muestra la tendencia de la entropía de Kolmogorov, comparando los resultados encontrados con los registros de ozono en la estación Cerro de la Estrella con los correspondientes a series de tiempo con un comportamiento perfectamente definido como son los de la función seno, función seno con ruido y los valores para ruido. Es de hacer notar que el método está perturbado por la presencia de ruido ya que, aunque la tendencia de los datos de

ozono y seno con ruido son similares, el comportamiento pudiera confundirse con el caótico, los datos de ruido muestra la tendencia esperada, en este caso, la cual tiende a aumentar al ir aumentando la dimensión de incrustamiento. Finalmente los datos de la función seno evidencian la tendencia esperada, la fluctuación alrededor del valor de cero.

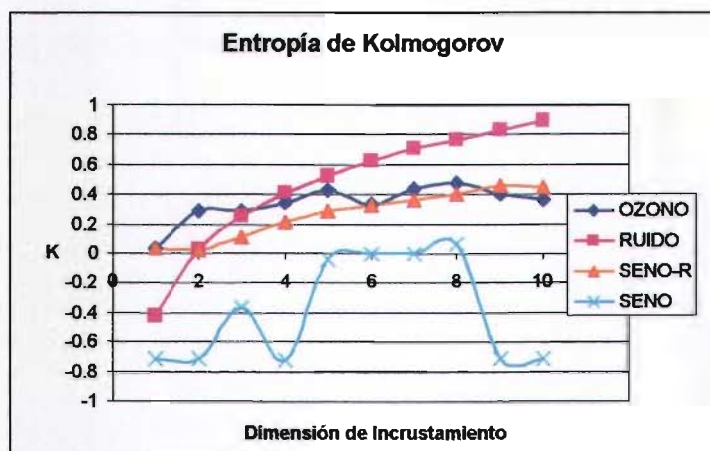


Figura 4.16. Tendencia de la entropía de Kolmogorov para los registros de las series de ozono, función seno con ruido, función seno y ruido

4.7.5. Exponente de Lyapunov

El cuadro 4.3 muestra los valores del cálculo del exponente de Lyapunov para: registros de ozono de la estación Cerro de la estrella, función seno con ruido, función seno, y datos aleatorios.

A pesar de que, teóricamente, el exponente de Lyapunov debe ser negativo para que se considere que se tiene un comportamiento dinámico periódico, el caso para los datos de ozono en la estación Cerro de la Estrella, muestra un valor para este exponente de 0.155; sin embargo, considerando el resultado para el cálculo del exponente para la serie de la función seno con ruido, la cual presenta el valor de 0.514, hace notorio que cualquier serie que contenga una parte de ruido afectará de manera evidente el valor del exponente de Lyapunov.

Se considera que el método aplicado para el cálculo queda fuera de duda, puesto que el resultado del exponente para los datos de una función periódica como es el caso de la función seno y para los datos aleatorios, son los esperados, menor a cero para la función seno y

cercano a uno (positivo) para los datos aleatorios. El resultado del exponente de Lyapunov para los datos caóticos es de 1.243 positivo.

Cuadro 4.3. Valores del exponente de Lyapunov para los registros de la serie de ozono de la estación cerro de la estrella, seno con ruido, seno y datos aleatorios.

| Valores del exponente de Lyapunov | |
|--|--------------------|
| Ozono (estación Cerro de la Estrella) | 0.155 ± 0.014 |
| Función seno con ruido | 0.514 ± 0.038 |
| Función seno | -0.001 ± 0.026 |
| Datos aleatorios | 0.895 ± 0.031 |
| Datos caóticos | 1.243 ± 0.09 |

Sin embargo, se hace notar que el método no fue capaz de distinguir la periodicidad inmersa dentro de la serie de la función seno con ruido. Por lo anterior, se consideró necesario buscar dentro del espectro de Lyapunov el comportamiento de la serie que nos permitiera corroborar que ésta presenta el comportamiento periódico, demostrado con los resultados encontrados de los análisis aplicados anteriormente para los registros de ozono. De la misma manera, se aplicó el método del espectro de Lyapunov para la serie de la función seno con ruido.

4.7.6. Espectro de Lyapunov

El cálculo del espectro de Lyapunov utiliza el método de Eckmann et, al. (1986), determinando el espectro completo de Lyapunov de los datos experimentales. El exponente de Lyapunov es medido por iteración, o por segundo si la escala de tiempo es apropiada. Un valor mayor de cero indica que los datos son probablemente caóticos. Sucede regularmente que se presente más de un espectro para la serie analizada. En este caso, se debe considerar que esto representa el número de ecuaciones diferenciales con las que el sistema pudiera ser modelado, asimismo estos espectros pueden exhibirse como positivos o negativos; si se presenta aunque sea uno de los espectros con valor negativo se debe considerar que la serie presenta características de determinismo (y probablemente de periodicidad) aún cuando se tengan espectros positivos, estos últimos pueden ser producto del ruido que puede contener la serie sometida a estudio. El cálculo del espectro de Lyapunov se recomienda entonces cuando

se sospecha que la serie en estudio presenta comportamiento determinista y el cálculo del máximo exponente de Lyapunov muestra un valor positivo, entonces para asegurar el tipo de comportamiento dinámico se recomienda trabajar el espectro completo de Lyapunov, aunque esto requiere considerablemente más esfuerzo de cómputo que la estimación del máximo exponente de Lyapunov.

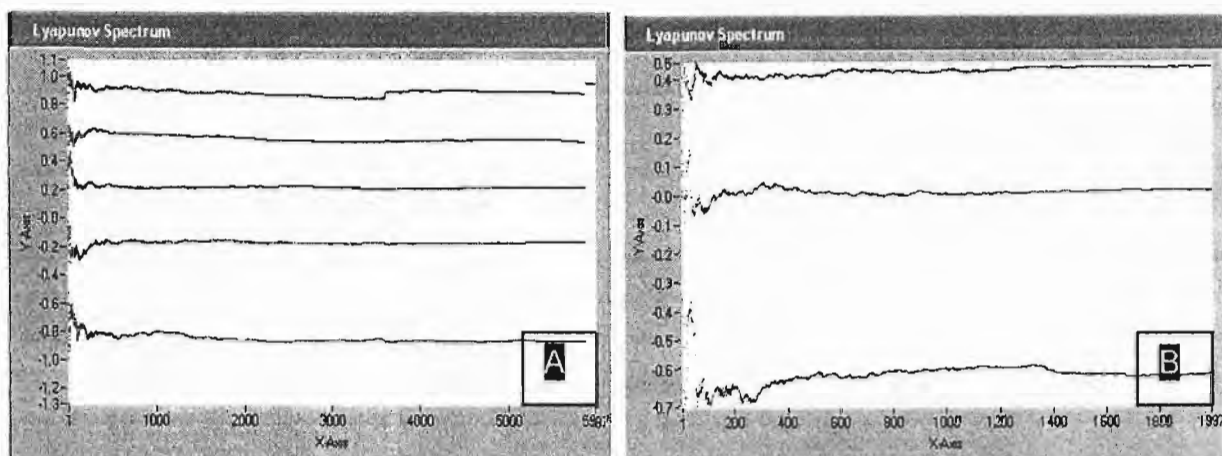


Figura 4.17. Espectro de Lyapunov (Reiss,1999). (A): Registros de ozono; (B): Función seno con ruido.

Los espectros de Lyapunov de los registros de ozono en la estación de monitoreo del Cerro de la Estrella y los correspondientes a la función seno con ruido se muestran en la figura 4.17; en esta se observa que, para el caso de los datos de ozono (Fig. 4.17 A), se presentan 5 espectros, de los cuales 2 son negativos, lo que confirma de acuerdo a lo establecido por los análisis que la serie tiene un componente determinista con la presencia de ruido; esta conclusión se basa en el hecho de que al comparar con el espectro de la función seno con ruido (Fig. 4.17B), se puede observar también la presencia de tres bandas espectrales, una de las cuales es positiva y las otras dos negativas (una muy cercana al cero tal como sucede con la función seno sin ruido).

4.7.7. Atractor en el Espacio - Fase

Sabemos que el estado de un sistema se puede describir por sus variables de estado, por ejemplo las variables de estado, temperatura y presión, para un sistema termodinámico

$$x^1(t), x^2(t), \dots, x^d(t), \quad (4.5)$$

Se debe observar que el superíndice está utilizado aquí como índice del componente y no como exponente. Las variables de estado d al tiempo t forman un vector $x(t)$ en el espacio - fase. Este vector se mueve en el tiempo y en la dirección que es especificada por su vector de la velocidad

$$\dot{x}(t) = \vec{F}(x) \quad (4.6)$$

La sucesión temporal de los vectores del espacio - fase forman una trayectoria (trayectoria del espacio - fase, órbita). El campo de velocidad $\vec{F}(x)$ es tangente a esta trayectoria. Para los sistemas autónomos, la trayectoria no debe cruzarse. La evolución en el tiempo de la trayectoria explica la dinámica del sistema, es decir el atractor del sistema. Si $\vec{F}(x)$ se conoce, el estado a un tiempo dado puede ser determinado integrando la ecuación del sistema (4.6). Sin embargo, una visualización de la gráfica de la trayectoria, en el espacio - fase, permite la determinación de un estado sin integrar las ecuaciones. La forma de la trayectoria del sistema indica si estos son periódicos o caóticos ya que dependiendo del comportamiento dinámico se tendrán figuras características en el espacio - fase, constituyéndose en el atractor propio de la serie de tiempo en estudio, estos comportamientos gráficos fueron tratados en el capítulo anterior (página 51).

Más abajo en la figura 4.18, se muestra la reconstrucción en el espacio - fase de los atractores correspondiente a las series de tiempo de ozono en la estación de monitoreo atmosférico del Cerro de la Estrella (Fig. 4.18 A); la función seno (Fig. 4.18B); función seno con ruido (Fig. 4.18C); y datos caóticos (Fig. 4.18D).

Se puede observar en la figura el comportamiento dinámico en el espacio - fase de la serie en estudio de los registros de ozono en la estación Cerro de la Estrella (Fig. 4.18 A), donde se muestra claramente un ciclo límite lo que nos indica un comportamiento periódico.

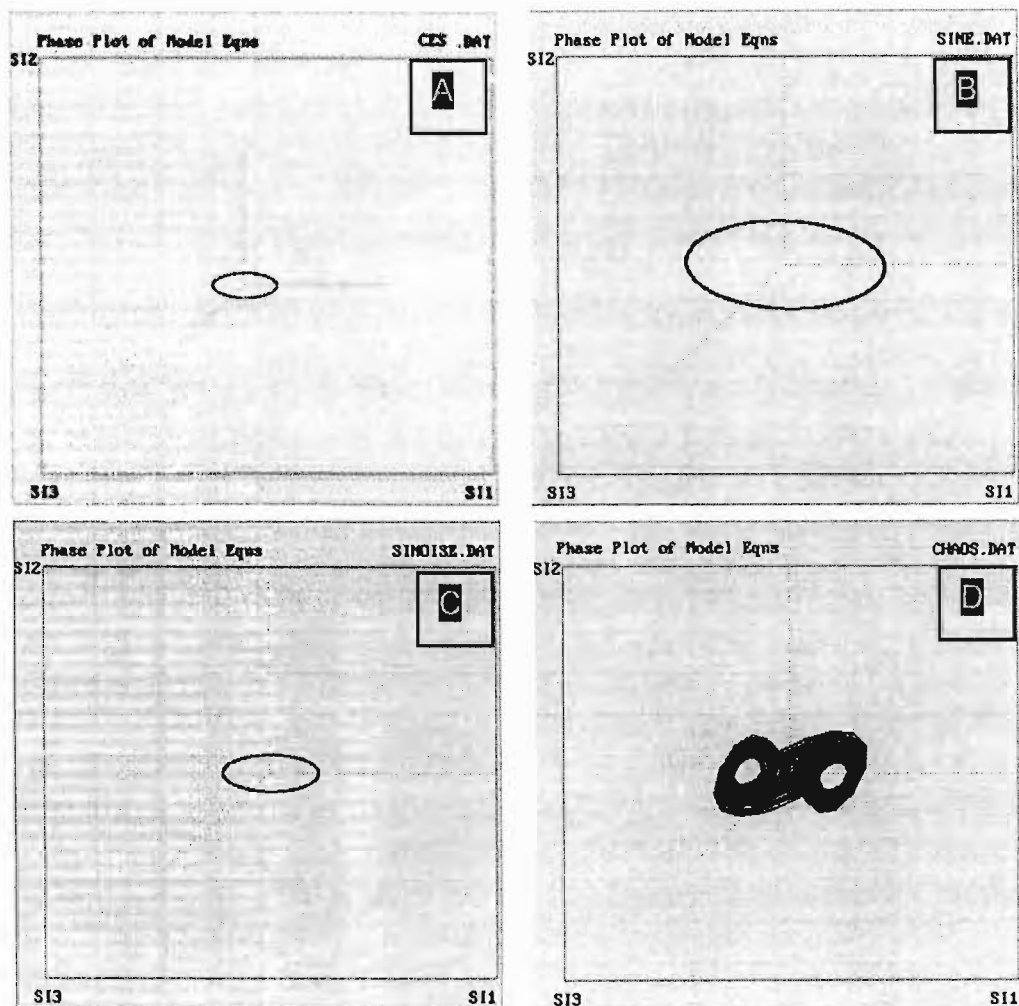


Figura 4.18. Gráficos mostrando los atractores en el espacio - fase para. (A): Registros de ozono en la estación Cerro de la Estrella; (B): Función seno; (C): Función seno con ruido; (D): Caos (Sprott, 1988)

Asimismo, en el gráfico del espacio - fase correspondiente a la función seno (Fig. 4.18B) se presenta un atractor de ciclo límite asociado a un sistema estable, lo que es propio de esta función; la gráfica de la función seno con ruido (Fig. 4.18C), muestra en el espacio - fase un ciclo límite como atractor, característico de sistemas periódicos, lo cual demuestra que el método aplicado para la matriz de correlación es capaz de encontrar a pesar del ruido el comportamiento dinámico de la serie aunque no llega a extraer el comportamiento estable como es el característico de la función seno, ya que el ruido presente enmascara este tipo de comportamiento; por último la aplicación de la matriz de correlación a los datos caóticos (Fig. 4.18D), muestra un atractor que no corresponde a ninguno de los comportamientos, lo que

asimismo demuestra que la aplicación de este método no encuentra ningún comportamiento que pudiera llevarnos a resultados erróneos o engañosos en cuanto al comportamiento dinámico de las series analizadas.

Después de haber aplicado las diversas herramientas computacionales a los registros de ozono de la estación de monitoreo atmosférico del Cerro de la Estrella y, habiendo comparado la aplicación de estas herramientas a series con comportamientos bien definidos, encontramos que son confiables para el efecto de conocer la dinámica de las series de tiempo; asimismo, se puede decir que aunque estas herramientas, aplicadas adecuadamente, no dan lugar a resultados que nos pudieran llevar a conclusiones erróneas, sin embargo, cabe decir que aún con estos resultados, estas herramientas deberán aplicarse con la reserva necesaria y desconfiar de los resultados hasta que estos no sean comprobados a través de la aplicación de las diversas herramientas que nos permitan acercarnos de manera más fehaciente al verdadero resultado del comportamiento dinámico de la serie en estudio.

4.8. Aplicación de los métodos a las estaciones de monitoreo seleccionadas

De acuerdo a lo anterior, una vez establecida la validez de los métodos para descubrir el comportamiento dinámico de las series de tiempo, estos serán aplicados a los registros de ozono de las estaciones de monitoreo atmosférico de la Zona Metropolitana del Valle de México seleccionadas, y los resultados serán tabulados para efectuar una comparación entre ellos y tratar de establecer si el comportamiento dinámico encontrado para la estación del Cerro de la Estrella es el que caracteriza a toda la zona metropolitana. Los resultados se muestran adelante (cuadro 4.4: Estación Tacuba; cuadro 4.5: Estación San Agustín; cuadro 4.6: Estación Merced; cuadro 4.7: Estación Hangares; cuadro 4.8: Estación Pedregal; cuadro 4.9: Estación Cerro de la Estrella). Los métodos aplicados para cada uno de los registros son: Análisis de recurrencia visual, cálculo de la entropía espacio temporal, frecuencia dominante, dimensión de correlación, entropía de Kolmogorov, exponente de Lyapunov, espectro de Lyapunov, atractor en la matriz de correlación.

Cuadro 4.4. Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación Tacuba.

| ESTACIÓN TACUBA (TAC) ZONA NOROESTE | | |
|---|---|--------------------------------|
| <i>Técnica de análisis</i> | <i>Resultado del análisis</i> | <i>Comportamiento Dinámico</i> |
| Gráficos de Recurrencia Visual | Estructura definida y distribución de colores uniforme | Periódico |
| Recurrencia Visual: Fluctuaciones de nivel. Método de conteo de cuadros de nivel | Estructura definida y distribución de colores uniforme en todos los niveles | Periódico |
| Entropía espacio - temporal | 0 % | Periódico |
| Frecuencia dominante | Frecuencia dominante en 0.041 | Periódico |
| Dimensión de correlación | 2.848 ± 0.671 | ----- |
| Entropía K | 0.330 | <i>Periódico con ruido*</i> |
| Exponente mayor de Lyapunov | 0.173 ± 0.023 | * |
| Espectro de Lyapunov | Existencia de espectros negativos | <i>Periódico**</i> |
| Matriz de correlación (Atractor) | Ciclo límite | Periódico |
| * Debido al resultado + se hizo necesario referirse al espectro de Lyapunov | | |
| ** La existencia de al menos un espectro negativo indica la existencia de una cierta periodicidad | | |

Cuadro 4.5. Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación San Agustín

| ESTACIÓN SAN AGUSTÍN (SAG) ZONA NORESTE | | |
|---|---|--------------------------------|
| <i>Técnica de análisis</i> | <i>Resultado del análisis</i> | <i>Comportamiento Dinámico</i> |
| Gráficos de Recurrencia Visual | Estructura definida y distribución de colores uniforme | Periódico |
| Recurrencia Visual: Fluctuaciones de nivel. Método de conteo de cuadros de nivel | Estructura definida y distribución de colores uniforme en todos los niveles | Periódico |
| Entropía espacio - temporal | 0 % | Periódico |
| Frecuencia dominante | Frecuencia dominante en 0.041 | Periódico |
| Dimensión de correlación | 2.907 ± 0.395 | ----- |
| Entropía K | 0.302 | <i>Periódico con ruido*</i> |
| Exponente de Lyapunov | 0.144 ± 0.020 | * |
| Espectro de Lyapunov | Existencia de espectros negativos | <i>Periódico**</i> |
| Matriz de correlación (Atractor) | Ciclo límite | Periódico |
| * Debido al resultado + se hizo necesario referirse al espectro de Lyapunov | | |
| ** La existencia de al menos un espectro negativo indica la existencia de una cierta periodicidad | | |

Cuadro 4.6. Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación Merced

| ESTACIÓN MERCED (MER) ZONA CENTRO | | |
|---|---|--------------------------------|
| <i>Técnica de análisis</i> | <i>Resultado del análisis</i> | <i>Comportamiento Dinámico</i> |
| Gráficos de Recurrencia Visual | Estructura definida y distribución de colores uniforme | Periódico |
| Recurrencia Visual: Fluctuaciones de nivel. Método de conteo de cuadros de nivel | Estructura definida y distribución de colores uniforme en todos los niveles | Periódico |
| Entropía espacio - temporal | 0 % | Periódico |
| Frecuencia dominante | Frecuencia dominante en 0.041 | Periódico |
| Dimensión de correlación | 3.96 ± 0.635 | ----- |
| Entropía K | 0.332 | <i>Periódico con ruido*</i> |
| Exponente de Lyapunov | 0.169 ± 0.028 | * |
| Espectro de Lyapunov | Existencia de espectros negativos | <i>Periódico**</i> |
| Matriz de correlación (Atractor) | Ciclo límite | Periódico |
| * Debido al resultado + se hizo necesario referirse al espectro de Lyapunov | | |
| ** La existencia de al menos un espectro negativo indica la existencia de una cierta periodicidad | | |

Cuadro 4.7. Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación Hangares

| ESTACIÓN HANGARES (HAN) ZONA CENTRO | | |
|---|---|--------------------------------|
| <i>Técnica de análisis</i> | <i>Resultado del análisis</i> | <i>Comportamiento Dinámico</i> |
| Gráficos de Recurrencia Visual | Estructura definida y distribución de colores uniforme | Periódico |
| Recurrencia Visual: Fluctuaciones de nivel. Método de conteo de cuadros de nivel | Estructura definida y distribución de colores uniforme en todos los niveles | Periódico |
| Entropía espacio - temporal | 0 % | Periódico |
| Frecuencia dominante | Frecuencia dominante en 0.041 | Periódico |
| Dimensión de correlación | 3.411 ± 0.839 | ----- |
| Entropía K | 0.295 | <i>Periódico con ruido*</i> |
| Exponente de Lyapunov | 0.171 ± 0.027 | * |
| Espectro de Lyapunov | Existencia de espectros negativos | <i>Periódico**</i> |
| Matriz de correlación (Atractor) | Ciclo límite | Periódico |
| * Debido al resultado + se hizo necesario referirse al espectro de Lyapunov | | |
| ** La existencia de al menos un espectro negativo indica la existencia de una cierta periodicidad | | |

Cuadro 4.8. Resultados del análisis del comportamiento dinámico de la estación Pedregal

| ESTACIÓN PEDREGAL (PED) ZONA SUROESTE | | |
|---|---|--------------------------------|
| <i>Técnica de análisis</i> | <i>Resultado del análisis</i> | <i>Comportamiento Dinámico</i> |
| Gráficos de Recurrencia Visual | Estructura definida y distribución de colores uniforme | Periódico |
| Recurrencia Visual: Fluctuaciones de nivel. Método de conteo de cuadros de nivel | Estructura definida y distribución de colores uniforme en todos los niveles | Periódico |
| Entropía espacio - temporal | 0 % | Periódico |
| Frecuencia dominante | Frecuencia dominante en 0.041 | Periódico |
| Dimensión de correlación | 2.500 ± 0.075 | ----- |
| Entropía K | 0.3000 | <i>Periódico con ruido*</i> |
| Exponente de Lyapunov | 0.152 ± 0.021 | * |
| Espectro de Lyapunov | Existencia de espectros negativos | <i>Periódico**</i> |
| Matriz de correlación (Atractor) | Ciclo límite | Periódico |
| * Debido al resultado + se hizo necesario referirse al espectro de Lyapunov | | |
| ** La existencia de al menos un espectro negativo indica la existencia de una cierta periodicidad | | |

Cuadro 4.9. Análisis del comportamiento dinámico de la estación Cerro de la Estrella

| ESTACIÓN CERRO DE LA ESTRELLA (CES) ZONA SURESTE | | |
|---|---|--------------------------------|
| <i>Técnica de análisis</i> | <i>Resultado del análisis</i> | <i>Comportamiento Dinámico</i> |
| Gráficos de Recurrencia Visual | Estructura definida y distribución de colores uniforme | Periódico |
| Recurrencia Visual: Fluctuaciones de nivel. Método de conteo de cuadros de nivel | Estructura definida y distribución de colores uniforme en todos los niveles | Periódico |
| Entropía espacio - temporal | 0 % | Periódico |
| Frecuencia dominante | Frecuencia dominante en 0.041 | Periódico |
| Dimensión de correlación | 2.589 ± 0.317 | ----- |
| Entropía K | 0.287 | <i>Periódico con ruido*</i> |
| Exponente de Lyapunov | 0.155 ± 0.014 | * |
| Espectro de Lyapunov | Existencia de espectros negativos | <i>Periódico**</i> |
| Matriz de correlación (Atractor) | Ciclo límite | Periódico |
| * Debido al resultado + se hizo necesario referirse al espectro de Lyapunov | | |
| ** La existencia de al menos un espectro negativo indica la existencia de una cierta periodicidad | | |

4.9. Análisis global del sistema dinámico formado por el ozono en el Valle de México

A continuación estableceremos el análisis global del sistema dinámico formado por la contaminación de ozono en la Zona Metropolitana del Valle de México, los resultados del análisis se muestran para la estaciones de monitoreo atmosférico seleccionadas, en los cuadros: 4.4 (estación Tacuba en la zona noroeste); cuadro 4.5 (estación San Agustín, zona noreste); 4.6 (estación Merced, zona centro); 4.7 (estación Hangares, zona centro); 4.8 (estación Pedregal, zona suroeste); 4.9 (estación Cerro de la Estrella, zona sureste).

4.9.1. Resultados del análisis de recurrencia visual

Los resultados del análisis de recurrencia visual aplicado a las estaciones de monitoreo atmosférico del ozono seleccionadas muestran, para todos los casos, estructuras perfectamente definidas y con trazos de color significativos, asociando a los colores predominantes, amarillo y naranja, distancias pequeñas entre los vectores. Asimismo, se visualiza, de acuerdo a la comparación de los resultados del análisis de recurrencia de las zonas del Valle de México estudiadas, que el movimiento de la trayectoria del sistema, generado por las series de tiempo, se caracteriza por un comportamiento dinámico determinista, esto de acuerdo a lo arriba mencionado, a la estructura que presenta el diagrama de recurrencia y a la comparación efectuada con un sistema perfectamente estable, como es el caso de la función seno. Asimismo, la comparación con la función seno con ruido, muestra que el método logra revelar de manera fehaciente dentro del ruido existente, haciendo uso de los parámetros de la dimensión de encajamiento y el tiempo de retraso, la periodicidad de esta función. De acuerdo a esto, los resultados mostrados para los registros de ozono pueden ser considerados confiables.

Al aplicar la técnica de, *conteo de cuadros de nivel*, para detectar fluctuaciones en el comportamiento dinámico en las series de tiempo del ozono permite, al analizar los diferentes niveles de fluctuación mostrados en la figura 4.9, se puede observar que, aunque se presentan diferencias en el comportamiento dinámico, éstas no reflejan un cambio drástico en la dinámica, en prácticamente todos los niveles de fluctuación (fig. 4.10) se observa estructura típica de comportamiento cuasiperiódico, periódico o multiperiodico. En ningún nivel de fluctuación se muestra comportamiento aleatorio o estocástico.

4.9.2. Resultados del análisis de la entropía espacio – temporal

Los resultados de este análisis muestran para todas las estaciones un valor de 0% en la entropía espacio - temporal, el cual es representativo de los sistemas estables. Cabe mencionar aquí la comparación efectuada con los resultados de la función seno y la función seno adicionada con ruido, las cuales presentan un valor de 0% de la entropía espacio – temporal. Sin embargo, debe anotarse que el valor de 0% en este parámetro para el caso de seno con ruido y los registros de ozono, fue alcanzado cuando se utilizaron los valores de la dimensión encajada y el tiempo de retraso aplicados para encontrar la periodicidad de estos sistemas en los diagramas de recurrencia visual.

4.9.3. Resultados del análisis de la frecuencia dominante

En este caso el resultado del análisis de los registros de ozono muestra un pico de frecuencia dominante con el valor de 0.041, lo que corresponde a una frecuencia de cada 24 horas para todos los casos. El valor de 24 horas corresponde al hecho de que se manejaron los registros horarios de ozono, por lo tanto los valores de la frecuencia corresponden al inverso del tiempo. Este valor de la frecuencia dominante se encuentra en todos los casos de las series de tiempo del ozono manejadas. Es de llamar la atención que ese valor aparezca en todas las épocas, independientemente del número de datos analizado y de la época del año en la que se haga el muestreo; esto nos hace pensar que los picos y la frecuencia del ozono no responden a las condiciones de difusión y/o advección debidas al comportamiento del aire (velocidad del viento principalmente) o, inclusive, a las condiciones de humedad relativa y de acuerdo con esto suponemos que estos picos de ozono diarios tienen su principal contribución debido al fenómeno fotoquímico; sin embargo, la intensidad de la contaminación (picos más altos) es debida a las fuentes que generan los precursores del ozono (NO_x, principalmente) y que en este caso la intensidad de la contaminación si se ve afectada por los fenómenos de difusión y advección, así como otras variables meteorológicas como la humedad relativa, tal como se muestra en la Figura 4.19.

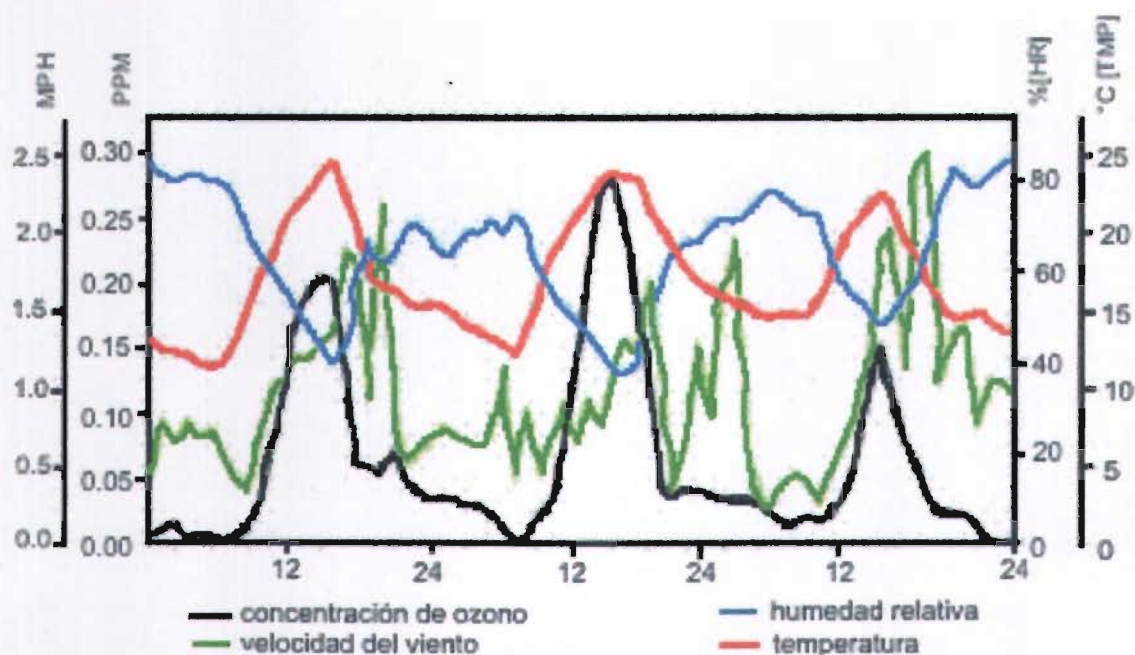


Figura 4.19. Comportamiento del ozono y las variables meteorológicas durante una contingencia ambiental en la ZMVM (Fuente: SIMAT. Informe del estado de la calidad del aire y tendencias 2002).

En la figura 4.19 se muestra el comportamiento del ozono y las variables meteorológicas, antes, durante y después de una contingencia ambiental; en esta figura se observa que la temperatura (debida a la acción del sol y por lo tanto sobre las reacciones fotoquímicas) es el elemento meteorológico que influye de manera fundamental en la presencia de los picos de ozono y que, en todo caso, la velocidad del viento, la cual se observa con un comportamiento tal vez aleatorio (sin que se haya hecho un análisis dinámico del mismo, solo por la forma gráfica que muestra) poco o nada influye en la presencia del contaminante y es de observar de la misma manera que la humedad relativa se encuentra totalmente relacionada con la temperatura del medio ambiente y que ésta disminuye debido a la temperatura.

La figura 4.20 muestra la relación entre el ozono, la temperatura y los precursores del ozono (NO_x), para un periodo de 8 días. Es evidente que mientras que la temperatura y el ozono están relacionados en cuanto a los máximos, en el caso de los dióxidos de nitrógeno, en esta figura se muestra que actúan como precursores del contaminante secundario (ozono) ya que como se mencionó en el capítulo 1, los dióxidos de nitrógeno absorben fácilmente la radiación solar dando como subproductos de esto el óxido de nitrógeno (NO) y una molécula

de oxígeno atómico la que al combinarse con O_2 nos da como consecuencia una molécula de ozono, así observamos en la figura 4.20 que estos productos se encuentran presentes antes de la formación del ozono y cuando el contaminante se encuentra en su máxima concentración, la concentración del NO_2 se reduce consecuentemente.

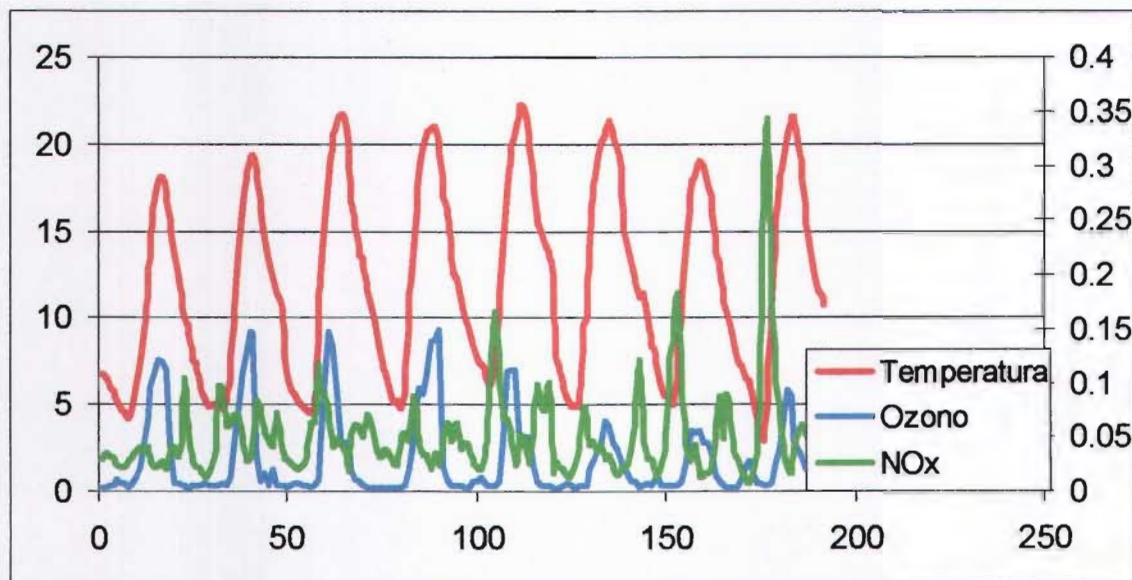


Figura 4.20. Relación entre la temperatura, el ozono y los productos de nitrógeno.

4.9.4. Resultados del análisis de la dimensión de correlación

En cuanto a la dimensión de correlación, los valores encontrados, aunque similares, oscilan alrededor del valor de 3, el cual si lo relacionamos con el número de ecuaciones diferenciales que nos permitirían modelar el sistema estaríamos hablando de un máximo de 7 ecuaciones diferenciales necesarias para el modelado. En nuestro caso consideramos que el ruido presente en las series, influye de manera significativa sobre estos valores, esto en función de los resultados encontrados para la función seno con ruido (dimensión de correlación de 2.05, mostrado en la Fig. 4.15B) y en comparación para un comportamiento periódico representado por la función seno la cual presenta un valor de la función de correlación muy cercana a cero. Por lo anterior consideramos que los resultados encontrados para la dimensión de correlación, en el caso de los registros de ozono en las estaciones de monitoreo atmosférico, no permitirían establecer de manera contundente el comportamiento periódico, pero de la misma manera esto no implica que estemos aceptando que el comportamiento sea aleatorio, sobre todo porque los resultados para los datos caóticos y aleatorios si muestran valores mayores a 5.

4.9.5. Resultados del análisis de la entropía de Kolmogorov (K)

Como fue mencionado, la tendencia de la entropía de Kolmogorov (K), permite determinar el contenido y ganancia de información en un sistema. En nuestro caso la tendencia, para todos los registros de ozono, oscilan alrededor de 0.3, que comparado con la tendencia obtenida para la función seno con ruido resulta similar, lo cual pudiera inducirnos a la tentación de considerarla periódica, sin embargo, aunque por esta comparación se piense que presenta un comportamiento periódico con ruido, no debe considerarse como un resultado concluyente del comportamiento dinámico de la serie. Nuevamente se hace notar que, la presencia de ruido induce a estos métodos a presentar resultados que, sólo después de corroborar con otros valores del análisis, permitirán aproximarse a la realidad sobre el comportamiento dinámico de estas series.

4.9.6. Resultados del análisis del exponente de Lyapunov

Los resultados mostrados del análisis del exponente de Lyapunov para los registros de ozono colectados en las estaciones de monitoreo atmosférico muestran valores mayores a cero, entre 0.14 y 0.17 con valores de incertidumbre que van desde 0.021 a 0.028. Nuevamente, al hacer la comparación la serie de la función seno con ruido esta presenta un valor de 0.514. Esto hace evidente que cualquier presencia de ruido afectará el resultado que pudiera esperarse de una serie con comportamiento periódico al aplicar este método para el cálculo del exponente de Lyapunov; se hace incuestionable que en buena medida estos métodos se ven afectados por la presencia de ruido pero que, en el caso de series que tengan un comportamiento perfectamente definido, ya sea caótico o periódico este será revelado sin lugar a dudas. De acuerdo a esto, se hace evidente que sólo a través de la comparación de los resultados de las series en estudio con series de comportamiento perfectamente definidos se logrará un acercamiento a la dinámica de estos sistemas; así, nuevamente con el cálculo del exponente de Lyapunov no podemos afirmar de manera categórica que la dinámica del ozono, en las diversas zonas del valle de México estudiadas, presente un comportamiento periódico, aunque si podemos decir que presenta aspectos cercanos al determinismo.

4.9.7. Resultados del análisis del espectro de Lyapunov

Se determinó el espectro completo de Lyapunov para las series de tiempo de ozono, se encontró que existe la presencia de exponentes negativos aunque también se observan exponentes positivos, de acuerdo a que se ha establecido que las órbitas caóticas presentan todos los exponentes positivos indicando con esto la divergencia de las órbitas; asimismo, se establece que para órbitas periódicas todos los exponentes de Lyapunov deberán ser negativos.

En nuestro caso, la presencia de exponentes de Lyapunov negativos, nos indica un acercamiento al determinismo y probablemente a la periodicidad, de la misma manera encontramos exponentes cercanos al valor de cero lo que nos indica una bifurcación, por lo tanto consideraremos un comportamiento cuasiperiódico de nuestras series; de la misma manera el método utilizado, aplica sin problemas para las series con comportamiento netamente periódico o para las series aleatorias, el caso de las series con una componente de ruido implicarán un mayor esfuerzo de análisis y comparaciones de comportamientos con series perfectamente conocidas para llegar a un acercamiento a la dinámica del sistema.

4.9.8. Resultados del análisis del atractor en el espacio – fase

Un gráfico del espacio fase del sistema dinámico bajo estudio de una serie de tiempo puede reconstruir un cuadro topológico equivalente del comportamiento multidimensional original del sistema usando la serie de tiempo de una sola variable observada. La idea es que el efecto (desconocido) del resto de las variables está reflejado en la salida de sistema, en su señal observable; la visualización de la gráfica de la trayectoria, en el espacio - fase, permite la determinación de un estado, la forma de la trayectoria del sistema, indica si estos son periódicos o caóticos, ya que dependiendo del comportamiento dinámico, se tendrán figuras características en el espacio - fase, constituyéndose en el atractor propio de la serie de tiempo en estudio.

En el caso que nos ocupa, se pudo observar que las trayectorias en el espacio – fase de todos los registros de ozono de las estaciones de monitoreo atmosférico seleccionadas presentan un ciclo límite como atractor, lo que nos indica, sin lugar a dudas, un comportamiento periódico. Debe hacerse notar que el método aplicado permitió encontrar, a pesar del ruido, el comportamiento de las series de tiempo en estudio.

Se ha estado mencionado con insistencia, que la presencia de ruido es la que afecta notablemente los resultados de algunos de los métodos aplicados, por lo tanto, se utilizaron algunas herramientas para la limpieza de las series; sin embargo, se observó que, al ser aplicadas, dan lugar a una gran pérdida de información, llevando a los métodos de análisis dinámico aplicados a encontrar resultados no esperados, lo cual se demostró al probar estas herramientas de limpieza con series bien conocidas a las que se les adicionó ruido (seno con ruido) dando como resultado del análisis, después de la aplicación del método de limpieza de ruido, comportamientos de tipo aleatorio lo que no tienen nada que ver con el comportamiento de la serie original.

CONCLUSIONES

Se deberá contar con bases de datos consistentes y en caso necesario, utilizar las herramientas de relleno adecuadas de acuerdo al tipo de datos.

La selección de las estaciones de monitoreo atmosférico estuvieron en función de la consistencia de los registros de datos y se seleccionaron de acuerdo a que estuvieran representadas todas las zonas geográficas.

La aplicación del método de análisis de recurrencia visual a las series de comportamiento bien definido, función seno, seno adicionado con ruido, ruido y series caóticas (modelo de Lorenz), permitió determinar que el método es confiable; sin embargo, se hizo necesario buscar los mejores valores de tiempo de retraso y dimensión incrustada (embebida) para extraer el comportamiento oculto en las series de tiempo de ozono, observándose, para nuestro caso, patrones y semejanzas con otras series cuyo comportamiento esta plenamente identificado.

La información mutua promedio y el método de vecinos falsos más cercanos se pueden utilizar para la primera aproximación al tiempo de retardo y la dimensión incrustada, respectivamente. Sin embargo, hay que tener presente, que el incrustamiento o encajamiento "óptimo" puede no ofrecer el mejor modelo predictivo. A menudo, valores más pequeños del tiempo de retardo y dimensión incrustada más grande que la "necesaria", hacen un mejor modelo de predicción.

A través del análisis de recurrencia visual se encontró que el comportamiento de las series de tiempo de los registros de ozono de todas las estaciones de monitoreo atmosférico seleccionadas presentaron un comportamiento dinámico determinista.

La aplicación del método de conteo de cuadros de nivel permitió determinar las fluctuaciones en el comportamiento dinámico del ozono que, de otra manera no es evidente en los gráficos de la serie de tiempo, aún aplicando otros métodos de análisis no lineal solo se puede establecer el comportamiento dinámico global de la series de tiempo.

Las fluctuaciones en el comportamiento dinámico localizadas, deberán permitir tener una visión más real a la hora de proponer un modelo que permita predecir el comportamiento del ozono ya que este método permite detectar cambios de nivel muy pequeños que de otra manera y por cualquier otro método no es posible distinguir.

La aplicación de esta técnica, al conocimiento del comportamiento dinámico de las series de tiempo, es factible y permite evidenciar con mayor detalle los cambios suaves o bruscos de la dinámica de estas series. Como ocurre en el caso de la serie de tiempo de los NOx.

En nuestro caso, pudimos observar que las series del ozono presentan una alta estructuración, lo que nos permite establecer el determinismo de la serie, pero, también dentro de esta estructuración, el diagrama de recurrencia visual nos mostró cambios dinámicos que podemos asociar a los cambios de concentración del ozono a través del tiempo.

Lo anterior, nos permite establecer la identificación de esos cambios de concentración en el tiempo y, de acuerdo al método de conteo de cuadros de nivel, identificar el motivo de estas “catástrofes”. Con esto en mente, es posible relacionar otros de los agentes que contribuyeron a la aparición de esas catástrofes y aplicar probablemente el análisis de recurrencia cruzado, seleccionando los agentes que puedan estar involucrados en este fenómeno.

La necesidad de contar con otros resultados que permitieran asegurar que el comportamiento dinámico encontrado por la técnica de recurrencia visual, y del conteo de cuadros de nivel, nos obligó a utilizar otras herramientas de análisis no lineal de los sistemas dinámicos en estudio.

Los resultados del cálculo de la entropía espacio – temporal para las series de tiempo estudiadas, arrojó que éstas presentan un comportamiento periódico, debido a que se obtuvieron valores del 0% en todos los casos, el método fue comprobado aplicándolo a series de comportamiento conocido.

El caso de los resultados encontrados en el cálculo de la dimensión de correlación debe verse, tanto como una corroboración del comportamiento periódico de las series, pero al mismo tiempo del nivel de complejidad que puede presentar la modelación de estos sistemas.

La entropía de Kolmogorov calculada para las series de ozono mostró que la tendencia del ozono es a permanecer constante en un valor similar al del seno con ruido. Los resultados de esta comparación muestran un acercamiento al comportamiento periódico esperado para estas series después de haber aplicado las herramientas antes mencionadas.

El caso del exponente y espectro de Lyapunov se debe ver con ciertas consideraciones especiales. La teoría establece valores muy específicos para demostrar la periodicidad de las series de tiempo. Sin embargo, la comparación de los resultados encontrados para las series de tiempo de ozono con los esperados para las series de comportamiento perfectamente definidos, muestran que el método está apegado a lo que indica la teoría cuando se trata de series con un comportamiento perfectamente periódico es decir, el exponente de Lyapunov da un valor de cero y el espectro muestra sólo exponentes negativos o cero. Sin embargo, en el caso de la función seno con ruido, el resultado del exponente muestra un valor positivo muy cercano a cero y el espectro muestra exponentes negativos y positivos. Algo similar sucede con las series de ozono de todas las estaciones de monitoreo. Así, la imposibilidad de encontrar un valor negativo o cero para el caso de la serie de la función seno con ruido nos hace suponer que el ruido presente en las series impide con el método aplicado, distinguir adecuadamente que se trata de un comportamiento periódico o cuasiperiódico (adicionado con ruido).

Dentro del análisis no lineal de los sistemas dinámicos, el conocimiento del atractor representativo de las series analizadas, nos permitió tener una mayor certeza del comportamiento dinámico de estas series. Este análisis mostró, para todos los casos, un atractor de ciclo límite, atractor representativo de los sistemas periódicos. Los mismos resultados se encontraron para las series de las funciones de seno y seno con ruido, no así para los datos caóticos los cuales en este caso mostraron las típicas alas de mariposa de Lorenz, ejemplo universal de un atractor extraño.

La aparición en el gráfico de la frecuencia dominante, de un pico bien definido, es independiente de cómo se divida la serie, del número de datos y en general, de cualquier manejo de los mismos. Lo anterior nos permite confirmar que ésta periodicidad es debida fundamentalmente a la influencia de los fenómenos fotoquímicos en las reacciones en las que se ve involucrado el ozono. Sin embargo, la intensidad (medida por la altura del pico) es dependiente de otros factores como pueden ser la difusión y convección de los precursores, así como la velocidad y dirección de los vientos.

Las herramientas computacionales aplicadas pudieron distinguir los comportamientos dinámicos específicos de las series de tiempo sin ruido; sin embargo, la presencia de ruido mostró que estas herramientas deberán ser aplicadas con la debida prudencia y que, asimismo,

los resultados obtenidos deberán tomarse con el escepticismo necesario que permita corroborar a través de diversos métodos, cuál es el comportamiento real de estas series.

La presencia de ruido afecta de manera notable los resultados del análisis no lineal de los sistemas dinámicos, sin embargo, no se recomienda utilizar herramientas de filtrado, si no se asegura que estas no tendrán un efecto sobre la pérdida de información del sistema, lo que implicaría que se encontraran resultados no esperados o totalmente ajenos al comportamiento dinámico de serie original.

Se deberá estudiar la dinámica de todos los elementos que contribuyen a la contaminación atmosférica del valle de México, recomendando que esto se haga en función de las reacciones propuestas por el modelo de Seinfeld u otros autores para tratar de ubicar dentro de esta cadena de reacciones los elementos que presentan comportamientos caóticos o aleatorios para definir la manera de controlar la intensidad de la contaminación, lo cual hace necesario conocer el origen de los contaminantes, los focos emisores, las diferentes tecnologías que pueden aplicarse para el control y reducción de estas emisiones (específicamente, los de origen antropogénico), y cual es el costo relativo asociado a cada una de ellas.

La eliminación total de la emisión de contaminantes de origen antropogénico a la atmósfera resulta materialmente imposible, y aún su necesaria reducción está condicionada por factores políticos, económicos y sociales. Por ello, es necesario que las inversiones que se realicen con el fin de reducir las emisiones de contaminantes sean lo más rentables posible desde el punto de vista medio ambiental, es decir, que se obtenga la mayor reducción de efectos perjudiciales de los contaminantes. El conocimiento de la dinámica de estas emisiones permitirá controlarlas de una mejor manera y definir políticas que en la realidad permitan abatir el problema de la contaminación.

REFERENCIAS

- Ahrens, C. D. (1993). *Essentials of Meteorology: An Invitation to the Atmosphere*. Minneapolis: West Publishing.
- Balankin, A.S. (1996). The concept of multifractal elasticity. *Physics letters A*. **210**, 51-59
- Braslavsky, J.H. (2001). *Control Automático, Ingeniería en automatización y control industrial*. Publicación de la Universidad Nacional de Quilmes. Buenos Aires. Argentina.
- Beristain, F., Vázquez-Coutiño, G. (2005). "An application of level square counting method for detecting fluctuation levels in ozone time series". *Memorias in Extenso en: The first international conference on nonlinear, fractional and stochastic dynamics and the first international workshop on complex systems, applied category theory, fractals, fractional calculus and chaos*. 22 al 28 de enero 2005. FES-Cuautitlán UNAM. México.
- Casdagli, M. (1997). Recurrence plots revisited, *Physica D* 108, 206.
- CEPIS (2003). "Curso de auto instrucción. Conceptos básicos sobre la meteorología de la contaminación del aire". Centro Panamericano de Ingeniería Sanitaria y Ciencias del Ambiente. Traducción de "Air pollution meteorology course" del Instituto de Capacitación en la contaminación del aire (APTI) de la agencia de protección ambiental de los Estados Unidos. <http://165.158.1.117/bvsci/e/fulltext/meteoro/cepis.html>
- Centro de súpercomputación de Galicia (2004):
<http://www.cesga.es/ga/default.html?../index.shtml&2>, Referencia a: Modelos de la calidad del aire: <http://www.cesga.es/telecursos/MedAmb/contenido.html>.
- Chatfield, C. (1989). *The Analysis of Time Series: An Introduction*, Chapman & Hall publishers.
- Denton, A., et al. (1990). A primer on chaos theory and its applications on cardiology. *American Hearth Journal*. Dec. 1420-1440.
- Duvall, P.; Keesling, J.; and Vince, A. (2000). "The Hausdorff Dimension of the Boundary of a Self-Similar Tile." *J. London Math. Soc.* 61, 649-760.
- Eckmann, J.P., Kamphorst, S.O., and Rulle, D. (1987). Recurrence Plots of Dynamical System. *Europhysics Letters*, **4** (9), 973-977.
- Eckmann, J.P., Kamphorst, S.O., Ruelle, D. and Ciliberto, S. (1987). Lyapunov exponents from a time series, *Phys. Rev. A* **34**, 4971.
- Edwards, G. (2000). *Introducción al análisis de sistemas dinámicos*. Ediciones Universidad Católica. Chile.

Eschenroeder, A., Martinez, P. (1972). Concepts and application of photochemical smog models. *Adv. Chem. Ser.* 113. 101p.

Finlayson-Pitts, B., Pitts, Jr . J. N. (1986). *Atmospheric Chemistry: Fundamental and experimental techniques*,. Edit. John Wiley & Sons, New York.

Franz, J.E. (1988). The pendulum Lab: University of Basel, Switzerland
<http://monet.physik.unibas.ch/~elmer/pendulum/index.html>

Fraser, A.M., Swinney,H.L.(1986). "Independent coordinates for strange attractors from mutual information". *Phys. Rev. A* **33**, 1134-1140.

Función lineal del IMECA.
<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnimeca.htm>

Grassberger,P., Procaccia, I. (1983a). Characterization of Strange Attractors. *Phys. Rev. Lett.* 50, 346–349.

Grassberger,P., Procaccia, I.(1983b). Estimation of the Kolmogorov entropy from a chaotic signal. *Phys. Rev. A* 28, 2591–2593.

Grassberger,P., Procaccia, I. (1983,c). Measuring the strangeness of strange attractors. *Physica* 9D. pp 189-208.

Grebogi,C.,et al.(1984). "Strange Attractors that are not Chaotic." *Physica D* 13: 261-268.

Hanna,S.R. (1973). A simple dispersion model for the analysis for chemically reactive pollutants. *Atmosf. Environ.* 7. 803p.

Hurst, H.E.(1951). *Trans. Am. Soc. Civ. Eng.* 116, 770.

Jacob,D.J. (1999). *Introduction to Atmospheric Chemistry* . Princeton University Press.

Jáuregui, E. (1971). *Mesomicroclima de la Ciudad de México*. UNAM. Instituto de Geografía, México.

Kantz, H. and Schreiber, T. (1997). *Nonlinear Time Series Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge (1997).

Kennel, M. B., Brown, R., Abarbanel,H. D. I.(1992). "Determining embedding dimension for phase-space reconstruction using a geometrical construction", *Phys. Rev. A* **45**, 3403.

Kelley, J.L. (1995). *General Topology*, D. van Nostrand Company, Inc.

Keubler, J., Giovannoni, J.M. Rusell, A.G. (1996). Eulerian modeling of photochemical pollutants over the Swiss Plateau and control strategy analysis. *Atmos. Environ.* 30. 951p.

Koebbe, M., Mayer-Kress, G. (1992), Use of recurrence plots in the analysis of time-series data, In: *Nonlinear Modeling and Forecasting*, M. Casdagli and S. Eubank (eds.), pp. 163-188, SFI Studies in the sciences of complexity, Proc. Vol. XII, Addison-Wesley.

Kononov, E. (2004). *Visual Recurrence Analysis (VRA)*. Version 4.6.

Lerma, G.C., et al (2001). Sistemas de análisis no lineal de la variabilidad de frecuencia cardiaca. *Rev. Electro* 113 - 118. Instituto tecnológico de Chihuahua

Lin, J.S., Hidelmann, L.M., ((1997). A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. *Atmos. Environ*, 31. 59p.

Long CS, NOAA (1996). National Weather Service, National Centers for Environmental Prediction. Ultraviolet Index Verification Report-Indications of Surface Ultraviolet Radiation Observation Characteristics. Climate Prediction Center Report.

Lu, R., Turco, R.P. (1996). Ozone distributions over the Los Angeles basin: Three-dimensional simulations with the SMOG model. *Atmosf. Environ*. 30. 4155p.

Mandelbrot, B.B. (1983). *The Fractal Geometry of Nature*. New York: W. H. Freeman & Co.

Milford, J.B., Gao, D., Russell, A.G. and McRae, G.J. (1992). Use of Sensitivity Analysis to Compare Chemical Mechanisms for Air Quality Modeling. *Environmental Science and Technology*, 26: 1179-1189.

Monroy, S.G. (2001). Modelos computacionales en problemas de contaminación ambiental. Tesis de Maestría. FES Cuautitlán UNAM.

Moon, F.C. (1987). *Chaotic Vibrations: An Introduction for Applied Scientists and Engineers*. N.Y. John Wiley & sons.

Monografías.com: El aire: Propiedades físicas y químicas del aire.
<http://www.monografias.com/trabajos/aire/aire.shtml>

Moran, J.M., M.D. Morgan y P.M. Pauley. (1994). *The Atmosphere and the Science of Weather*. 4ª ed. Nueva York: Macmillan College Publishing.

Nayfeh, A. H. and Balachandran, B. (1995). *Applied Nonlinear Dynamics: Analytical, Computational, and Experimental Methods*. New York: Wiley, pp. 538-541.

Noriega, C. M. (1998). Aplicación de la teoría de las bolas de control de la calidad de los procesos de pintura electroforética automotriz. Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán UNAM, Tesis de maestría en Físicoquímica. México.

Orduña, E. R. (2001). Circuito con comportamiento caótico. Facultad de Ingeniería UNAM. Tesis de Maestría en Ingeniería Eléctrica. México.

Orozco, J. (2002). Predicción de ozono mediante redes neuronales heterogéneas. Departamento de Lenguajes y sistemas informáticos. In Proceedings Workshop de Aprendizaje Automático y Data-Mining, IBERAMIA. Universidad Politécnica de Cataluña. Barcelona, España.

<http://www.lsi.us.es/redmidas/indice.htm>

Ozorio de Almeida, A. (1998). Hamiltonian systems: Chaos and quantization. Cambridge University Press. N.Y.

Peitgen, H., Jürgens, H. and Saupe, D. (1992). Chaos and Fractals: New Frontiers of Science. New York: Springer-Verlag.

Peters, L., Berkowitz, C., Carmichael, G., Castro, R., Fairweather, G. (1995). The Current State and Future Direction of Eulerian Models in Simulating the Troposphere Chemistry and Transport of Trace Species, A Review. Atmos Environ. 29. 189p.

Quadri, G., Sánchez, L.R. (1994) La ciudad de México y la contaminación atmosférica. Ed. Limusa. México.

Rasband, S. N. (1990). Fractal Dimension: Chaotic Dynamics of Nonlinear Systems. N.Y. Wiley, pp. 71-83.

RAMA. Red Automática de monitoreo atmosférico.

<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnrama2.htm>

Rañada, A. (1994). "Dinámica clásica". Alianza Universidad. Capítulos 14 a 16 y Apéndices 1 a 4. Madrid, España.

REDDA. Red de Depósito Atmosférico.

<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnredda2.htm>

REDMA. Red Manual de Monitoreo Atmosférico.

<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnredma2.htm>

REDMET. Red Meteorológica.

<http://www.sma.df.gob.mx/simat/mide>

Reiss, J. (1999). Nonlinear Dynamics Toolbox. (NDT) Version 0.9. Applied Chaos Lab.

Ruelle, D., Takens, F. (1971). On the nature of turbulence. Commun. Math. Phys. 20, 167-192.

Russell, D.A., Hanson, J.D., Ott, E. (1980). Dimension of Strange Attractors. Phys. Rev. Lett. 45, 1175-1178.

Sandri, M. (1996). "Numerical Calculation of Lyapunov Exponents." *Mathematica J.* 6, 78-84.

Sauer, T. (1994). Time Series Prediction by Using Delayed Coordinate Embedding, Addison-Wesley, Harlow, UK.

Seinfeld, J.H. (1977). International conference on oxidants, Analysis of evidence and viewpoints. California Institute of Technology. Pasadena California.

Seinfeld, J.H. (1986). "Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution", John Wiley & Sons, New York.

Seinfeld, J.H. (1988). "Ozone Air Quality Models: A Critical Review", Journal of Air Pollution Control Association, Vol.38, No. 5, pp. 616-645.

SIMAT. Sistema de monitoreo atmosférico de la ciudad de México. Gobierno del Distrito Federal. Secretaría del Medio Ambiente. RAMA – Red Automática de monitoreo Atmosférico. referencia en <http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnrama2.htm> (agosto 2004).

SIMAT (Sistema de Monitoreo Atmosférico). Informe del estado de la calidad del aire y tendencias 2002. Secretaría del Medio Ambiente del Distrito Federal.

Smoluchowsky, R. (1986). "El sistema solar". Biblioteca Científica Americana, Editorial Labor.

Solé, R., Manrubia, S. (1993). Orden y Caos en Sistemas Complejos, Edicions UPC, España.

Schouten, J.C. y Van den Bleek, C.M. (1992). Chaotic Hydrodynamics of Fluidization: Consequences for Scaling and Modeling of Fluid Bed Reactors. *AIChE Symp. Series*, 289 (88), 70-84.

Sprott, J.C. (1998). "Chaos Data Analyzer". Version 2.1. professional. University of Wisconsin. Madison.

Strogatz, S.H. (1994). *Nonlinear Dynamics and Chaos*, Addison-Wesley.

Termonia, Y. (1984). Kolmogorov entropy from a time series. *Phys. Rev. A* 29, 1612–1614.

Tilden, J., Seinfeld, J.H. (1982). Sensitivity analysis of a mathematical model for photochemical air pollution. *Atmosf. Environ.* 16. 1357p.

Tufillaro, N.B., Abbot, T., Reilly, J. (1992). An experimental approach to nonlinear dynamics and chaos. Addison – Wesley Publishing Company.

Unidades. Sistema de monitoreo atmosférico de la Ciudad de México IMECA . Gobierno del Distrito Federal secretaria del medio ambiente.
<http://www.sma.df.gob.mx/simat/pnimeca.htm>

Vázquez-Coutiño, G.A., Rojas-Hernandez, A. (2001). On a ball theory of quality control in analytical chemistry, In: *Sensors and Chemometrics*, editors: Ma. Teresa Ramírez et al. pp. 105-120, Research Signpost, ISBN: 81-7736-067-1.

Vázquez-Coutiño, G.A., Rojas-Hernandez, A., Carreto-García, S., Cázarez-Ibañez, E., García-Ochoa, E.M. (2002). Quimiometría y Teoría de las Bolas de Control de la Calidad, Memorias in Extenso del XVII Congreso Nacional de Química Analítica (A.M.Q.A.), 4-6 de septiembre, Xalapa, Ver., México, pp 19-24.

Vázquez-Coutiño, G.A. (2004). Detección de cambios de nivel en señales analíticas con fluctuaciones mediante la técnica del gráfico de recurrencia. Memorias in Extenso del XVIII Congreso Nacional de Química Analítica (A.M.Q.A.), Pachuca, Hidalgo, pp 272 -277

Yule, G. U. (1927). *On a method of investigating periodicities in disturbed series*. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A, Vol. 226, pp. 267-298.

Wayne, L., Kokin., Weisburd, M. (1973). Controlled evaluation of the reactive environmental simulation model. EPA R4 Vol. 1.

Zbilut, J.P., Webber, C.L. (1992). Embeddings and delays as derived from quantification of recurrence plots. Phys. Lett. A, (171) 199-203.