

ESTUDIO DE LOS INVARIANTES DE LA DINÁMICA DEL OZONO MEDIANTE TÉCNICAS DEL ANÁLISIS NO LINEAL

Núria CASTELL BALAGUER

Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo. Grupo de Dinámica de Contaminantes

RESUMEN

En este texto se describe un reciente método de análisis no lineal de series temporales que permite construir el marco para diseñar modelos de predicción de los niveles de ozono. El cálculo del mayor exponente de Lyapunov indica la presencia de caos. El uso de la estadística de falsos vecinos determina que la dinámica del ozono troposférico se puede describir en un espacio de fases de dimensión entre 10 y 15, reconstruido usando un retraso temporal de 5 horas.

Palabras clave: Ozono troposférico, dinámica no lineal, dimensión fractal, exponentes de Lyapunov

ABSTRACT

This text describes the application of recent methods of nonlinear time series analysis to build a framework for the design of ozone prediction models. The maximal Lyapunov exponent estimation confirms the presence of chaos. Use of the false nearest neighbors statistic shows that the dynamics of tropospheric ozone can be described in a phase space of dimension 10 to 15. This is reconstructed with a 5 hours time delay.

Key words: *Ozone, nonlinear dynamics, fractal dimension, Lyapunov exponents*

1. INTRODUCCIÓN

El aumento de la población, combinado con un inmaduro desarrollo industrial, ha llevado a una producción y concentración drásticamente intensificadas de contaminantes del aire en áreas localizadas. Los efectos perjudiciales para la salud humana y la vegetación producidos por un ambiente con concentraciones de ozono más altas de un cierto valor, hace que sea necesario el estudio de su dinámica, para poder realizar modelos de predicción. El estudio de la dinámica del ozono sería una tarea casi imposible con las técnicas clásicas, debido a su inherente variabilidad espacial y temporal, la variabilidad en la emisión de concentraciones, la influencia de las condiciones meteorológicas, etc. En este texto introduciremos técnicas no lineales fundamentadas en la teoría del

caos. Se estudia la dinámica del ozono en el espacio de fases multidimensional construido a partir de las series temporales de la concentración horaria de ozono en la población de Granollers (Vallès Oriental, Catalunya).

Desde hace algunos años se está realizando un gran esfuerzo para reducir las concentraciones de ozono en áreas donde los niveles máximos aceptados eran superados con demasiada frecuencia. Con la entrada en vigor de la Directiva 92/72/CEE y su aplicación en la legislación estatal (RD 1494/1995), que obliga a las administraciones a informar a los ciudadanos cuando se supere el umbral de los $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ como valor medio en una hora del ozono troposférico, se hace necesaria la instalación de estaciones automáticas, en todas aquellas localidades que no tuvieran, iniciando así, un control sistemático de los contaminantes más importantes.

Todo ello hace que sea más fácil disponer de series temporales (puntuales) de la concentración de contaminantes como el ozono, algo impensable hace tan solo una década. El avance en las predicciones es algo necesario ya que, si no se avanza en ese aspecto, el hecho de informar a la población sobre algo que ya ha ocurrido provoca en esta misma población el sentimiento de inutilidad de la información recibida. Por otro lado, la falta de una capacidad predictiva fiable limita las posibilidades de intervención por parte de las autoridades. Los procedimientos clásicos que se han venido siguiendo en el análisis de las señales de ozono, se basan principalmente en la construcción de modelos a partir de los principios básicos de la física, no obstante, tales principios parten de unas condiciones idealizadas que están bastante lejos de la realidad, especialmente desde el punto de vista de la heterogeneidad espacio-temporal. La inherente variabilidad en el espacio y en el tiempo del ozono, hace que las ecuaciones básicas utilizadas en los modelos sean aproximadas. Los modelos de predicción más modernos se basan en métodos de regresión en los que se incluyen los valores pasados del ozono y de sus precursores, así como de parámetros referentes a las condiciones meteorológicas (temperatura y dirección del viento). Sin embargo, es necesario calibrar cada modelo en el lugar donde vaya a ser aplicado. Por otro lado, la importancia y el número de parámetros utilizado en los modelos de regresión parece tener una dependencia con el emplazamiento (WARK, *et al.*, 1997).

Todas estas dificultades inherentes hacen que sea conveniente explorar técnicas alternativas. Nosotros utilizaremos los recientes avances en dinámica no lineal. De hecho, el estudio realizado apoya la posible presencia de una dinámica caótica en las concentraciones horarias de ozono para la localidad de Granollers. Lo cual supone un aliciente para seguir profundizando en este tipo de estudios. De hecho, ya se han realizado estudios similares en ciudades fuertemente afectadas por la contaminación como Mejico (RAGA *et al.*, 1996) y Cincinnati (CHEN *et al.*, 1998).

2. ANÁLISIS NO LINEAL

La principal idea en el estudio de series temporales mediante técnicas no lineales, es que aunque la descripción matemática exacta de la dinámica de nuestro sistema sea desconocida, podremos reconstruir el espacio de fases a partir de una sola variable. El presente trabajo se centrará en determinar si se introducen características propias de la dinámica de sistemas caóticos y en la reconstrucción del espacio de fases, todo ello a partir de la serie temporal del ozono.

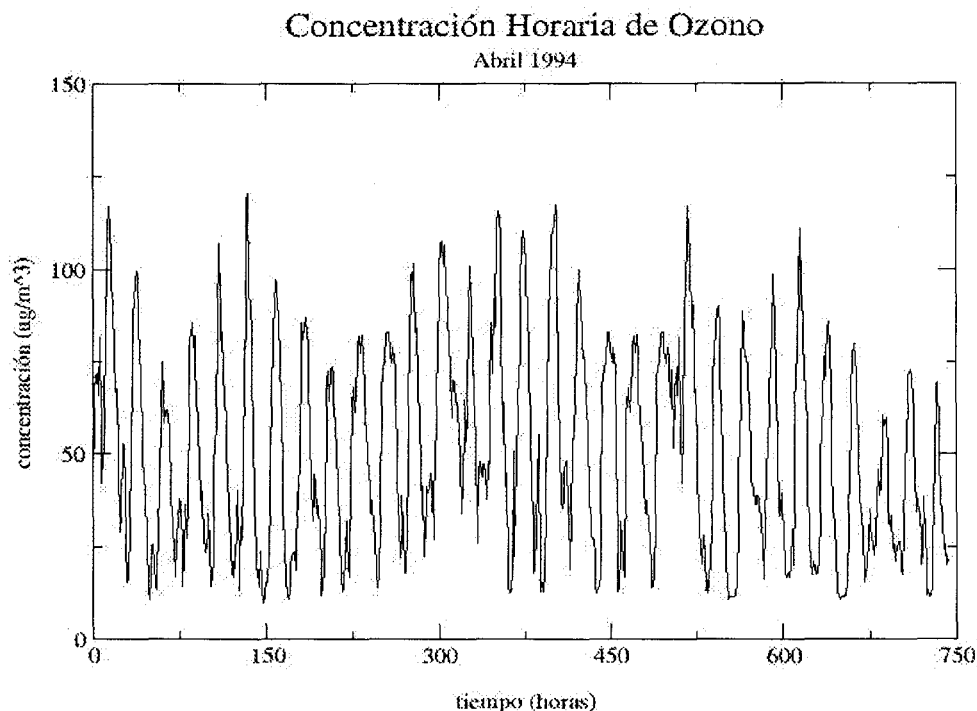


Fig. 1: Evolución de la concentración horaria de ozono troposférico para el mes de abril.

La serie utilizada comprende los meses de Abril a Diciembre de 1994, las medidas son tomadas mediante una estación automática, situada en una de las calles de la población, sacando una media horaria de la concentración de ozono entre otros contaminantes del aire. De esta forma, la serie analizada tiene más de 6000 puntos. En la Figura 1 se ha representado la serie temporal correspondiente al mes de Abril, donde se observa la variación diaria del ozono, con un nivel bajo en las mañanas y noches, y un nivel máximo pasado el mediodía; con un incremento y decrecimiento relativamente rápidos. En el espectro de potencias de Fourier, que se muestra en la Figura 2, podemos observar la aparición de una banda continua de frecuencias. La sola aparición de una banda continua de frecuencias en nuestro espectro no es una condición suficiente, pero sí necesaria, para asegurar que el sistema describe una dinámica caótica (ADDISON, 1997).

Cuando analizamos la serie temporal de la concentración del ozono, estamos estudiando la dinámica de todo el sistema (compuesto de muchas otras variables: radiación solar, viento, humedad, precipitaciones locales...) que determinan la evolución en el tiempo de los niveles de concentración del ozono troposférico. Mediante las técnicas del análisis no lineal, calcularemos los invariantes del movimiento, como la dimensión fractal y los exponentes de Lyapunov. La dimensión fractal es una medida de las propiedades geométricas del atractor. Los exponentes de Lyapunov establecen la rapidez con que dos trayectorias del sistema en el espacio de fases divergen o convergen al evolucionar desde condiciones iniciales muy próximas. Ambos son independientes de los

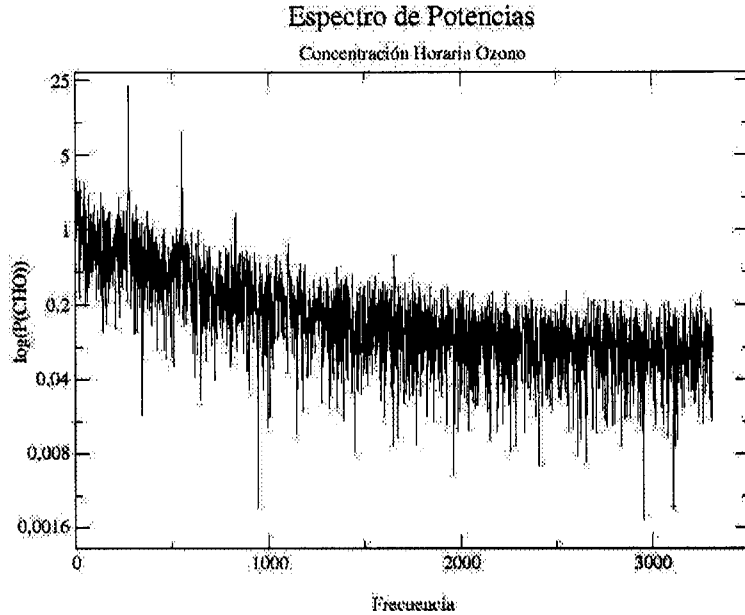


Fig. 2: Espectro de potencias de la serie temporal del ozono troposférico.

cambios en las condiciones iniciales, y del sistema de coordenadas en el cual observemos el atractor, lo que significa que podemos calcularlos en el espacio de fases reconstruido. Para la reconstrucción del espacio de fases seguiremos el procedimiento propuesto por Ruelle, que consiste en el uso de múltiples retrasos temporales a partir de series temporales unidimensionales, $s(t) = s(t_0 + n\tau) = s(n)$, donde t_0 es el tiempo inicial de mediada y τ es el intervalo de tiempo entre dos medidas consecutivas (en nuestro caso 1 hora). Esto se hace creando vectores en un espacio de dimensión d a partir de retrasos temporales T en la serie original s (ABARBANEL,1996).

$$\bar{y}(n) = [s(t_0 + n\tau), s(t_0 + (n+T)\tau) \dots s(t_0 + (d-1)T)\tau] = [s(n), s(n+T), s(n+(d-1)T)]$$

El primer paso será la determinación del retraso temporal y después calcularemos la dimensión d del espacio de fases, que no necesariamente va a coincidir con la del espacio original.

2.1. Elección del retraso temporal

La elección de un retraso temporal adecuado es muy importante ya que, si este es demasiado corto, las coordenadas del vector $y(n)$ no serán independientes, de forma que no podremos obtener ninguna información del espacio de fases reconstruido. Por otro lado, si el retraso temporal que escogemos es demasiado grande ocurrirá lo contrario, es decir, no habrá ninguna conexión entre una coordenada y la siguiente, llegando al mismo resultado que antes. En las Figuras 3 y 4 se representan dos herramientas matemáticas para la elección del retraso temporal, la función de autocorrelación y la función de información mutua.

En el caso de la función de autocorrelación, C , comparamos linealmente dos puntos de la serie temporal separados por un retraso T . Tomando como retraso temporal el valor de T que primero proporcione un valor de C igual a 0. En la Figura 3 comprobamos que este valor corresponde aproximadamente a $T=8$.

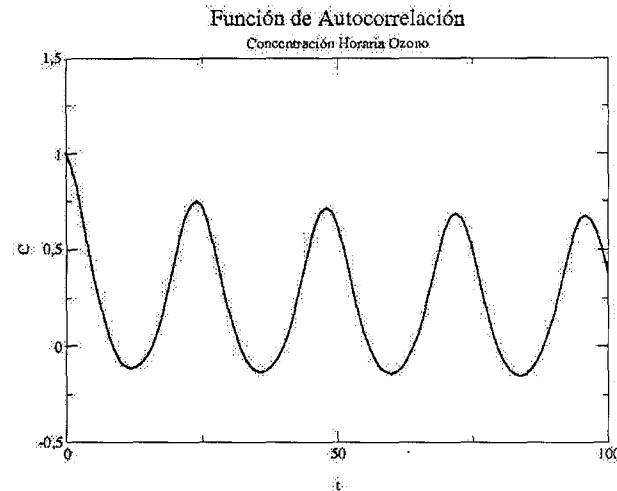


Fig. 3: Función de autocorrelación para la concentración horaria de ozono troposférico.

La función de información mutua se diferencia de la anterior en que es una medida de la dependencia general de dos variables. Para la elección de T se usa el primer mínimo de la función de información mutua definida entre los conjuntos de medidas $s(n)$ y $s(n+T)$ como:

$$I(t) = \sum_{s(n), s(n+T)} P(s(n), s(n+T)) \log_2 \left[\frac{P(s(n), s(n+T))}{P(s(n)) \cdot P(s(n+T))} \right]$$

donde P representa la distribución de probabilidad. Si las series temporales presentan una dinámica determinista, estas probabilidades pueden ser entendidas como frecuencias relativas de acontecimiento de los valores. La función de información mutua para la serie de concentración del ozono está representada en la Figura 4, y en ella observamos que el primer mínimo se encuentra entre $T=3$ y $T=8$. Los resultados obtenidos utilizando un retraso temporal entre esos dos valores difieren muy poco, por ello podemos utilizar uno u otro indistintamente.

2.2. Elección de la dimensión de embebido

Para la elección de la dimensión d apropiada para la descripción de la dinámica de nuestro sistema en el espacio de fases reconstruido o espacio de embebido, utilizaremos el método de los falsos vecinos, del inglés, *false nearest neighbors* (ABARBANEL *et al.*, 1993). Éste método examina, para una dimensión d , el vecino más cercano de $y(n)$ y su comportamiento para una dimensión $d+1$. Si el vecino cercano se aleja a medida que vamos aumentando la dimensión diremos que se

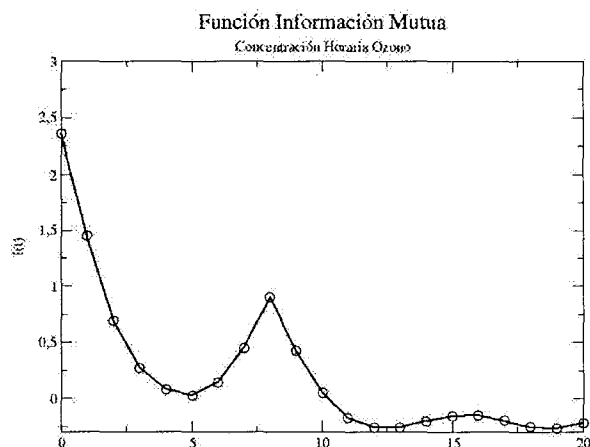


Fig. 4: Función de información mutua para la concentración horaria de ozono troposférico.

trata de un falso vecino, y elegiremos como dimensión d del espacio de fases reconstruido aquella en la que ya no existan falsos vecinos. Cuando el porcentaje de falsos vecinos cae a cero, la estructura geométrica del atractor está completamente desplegada y las órbitas del sistema a través del espacio de fases carecen de ambigüedad y no se cruzan.

En la Figura 5 se ha representado el porcentaje de falsos vecinos para dimensiones $1d20$ para la serie temporal de la concentración de ozono, el porcentaje de falsos vecinos se hace cero para $d12$, y sigue siendo cero para dimensiones superiores. Por tanto, necesitamos un espacio de 12 dimensiones para desplegar el atractor correspondiente a la dinámica del ozono, y es en ese espacio en el que podemos hacer las predicciones. Si utilizáramos dimensiones más bajas, no conoceríamos

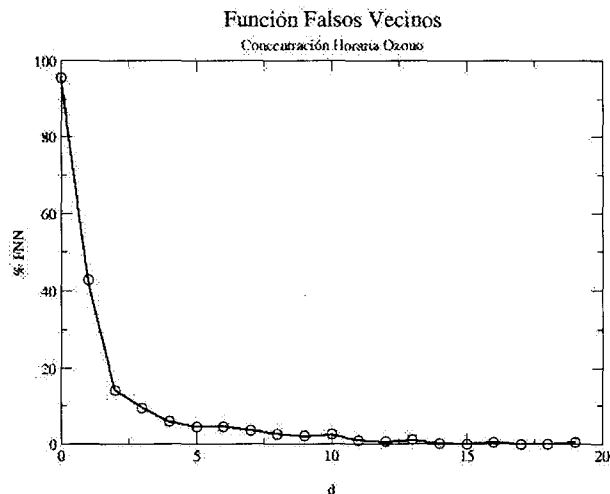


Fig. 5: Porcentaje de falsos vecinos en función de la dimensión de embebido.

con certeza donde se encuentra cada órbita y no podríamos realizar predicciones.

El ruido puede contaminar esa propiedad de las órbitas, aumentando la dimensión necesaria para desplegar el atractor. No obstante el algoritmo utilizado es bastante robusto ante el ruido, y mostraría una falsa tendencia a cero en el porcentaje de falsos vecinos y un posterior aumento para dimensiones un poco mayores (ABARBANEL, 1996).

2.3. Dimensión del atractor

La dimensión de un atractor es una medida de sus propiedades geométricas de escala, es decir, de su fractalidad. Para calcular la dimensión fractal hemos utilizado la dimensión de correlación, que nos da una cota superior al valor real de la dimensión fractal del atractor.

En la Figura 6 se representa la dimensión de correlación en función de la dimensión de embebido, se observa que la saturación en la dimensión de correlación aparece para $d \approx 15$ con un valor de $5 \leq D_C \leq 6$, encontrándose entre ambos valores la dimensión fractal de nuestro atractor. Éste valor nos indica el número mínimo de variables necesario para describir la dinámica horaria del ozono.

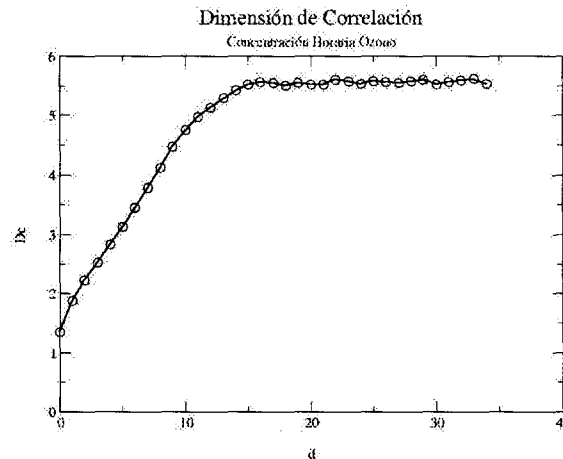


Fig. 6: Dimensión de correlación en función de la dimensión de embebido.

3. CÁLCULO DE LOS EXPONENTES DE LYAPUNOV

El caos nace del crecimiento exponencial de pequeñas perturbaciones, junto con mecanismos globales de plegado que garantizan la bondad de las soluciones. Dicha inestabilidad exponencial se caracteriza mediante el espectro de Lyapunov, que consiste en el cálculo de los exponentes de Lyapunov para las direcciones ortogonales de máxima divergencia ó convergencia en el espacio de fases. En el caso de series temporales unidimensionales el espacio de fases se refiere al espacio de fases reconstruido tal y como se ha indicado en el apartado 2. Matemáticamente podemos escribirlo como sigue; tras un tiempo t , las trayectorias divergen exponencialmente siendo entonces su separación ϵ_t :

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \cdot e^{\lambda t}$$

donde λ , es el exponente de Lyapunov. Un exponente positivo equivaldría a estirar el atractor en el espacio de fases, es decir, puntos cercanos de dos trayectorias terminarían separándose. Uno menor que cero equivaldría a contraer. Por otro lado, el atractor de una señal periódica tendrá solo exponentes de Lyapunov cero y negativos, mientras que el ruido los tiene todos positivos. Para poder clasificar a un atractor como extraño, habrá de tener como mínimo un exponente mayor que cero.

Si existe al menos un exponente positivo, el mayor de ellos predominará sobre los demás y el sistema será altamente sensible a las condiciones iniciales. De esta forma, los exponente de Lyapunov proporcionan una herramienta poderosa para categorizar un atractor.

Para evaluar los exponentes de Lyapunov tenemos que trabajar en un espacio de fases de dimensión $d=12$, que corresponde a la dimensión de embebido calculada en el subapartado 2.2. Se ha calculado el mayor de los exponentes de Lyapunov utilizando el algoritmo de Kantz (KANTZ, L., *et al.*, 1994), obteniendo un valor positivo y próximo a cero, lo que indica una posible presencia de bifurcaciones.

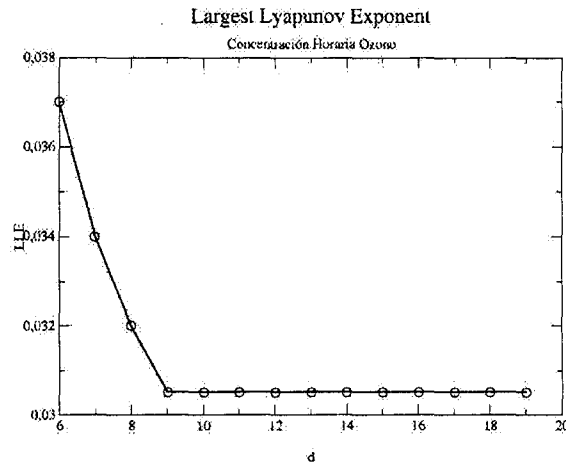


Fig. 7: Mayor exponente de Lyapunov en función de la dimensión de embebido.

En la Figura 7 se ha representado el valor del mayor exponente de Lyapunov para dimensiones de embebido entre 6 y 20, tomando una separación inicial de las trayectorias de $\varepsilon_0=0.07$. Se observa una saturación a partir de $d=10$, lo que viene a corroborar la dimensión de embebido calculada por el método estadístico de los falsos vecinos.

4. CONCLUSIONES

En este artículo se han estudiado los invariantes de la dinámica del ozono mediante métodos de análisis no lineal de series temporales. La serie temporal analizada corresponde a medidas de la concentración horaria de ozono. Los datos muestran que el atractor se encuentra inmerso en un espacio de fases con una dimensión de embebido comprendida entre 10 y 15. Los invariantes del movimiento, exponentes de Lyapunov y dimensión fractal, se han determinado para $10 \leq d \leq 15$. Concluyendo que la dinámica del ozono presenta una alta sensibilidad a las condiciones iniciales y que su dimensión fractal está comprendida entre 5 y 6.

Lógicamente, el siguiente paso sería el análisis de series temporales de otros contaminantes y de variables meteorológicas encaminados a la construcción de modelos de predicción que tengan en cuenta la fractalidad del sistema.

5. AGRADECIMIENTOS

Este análisis nace a raíz de la colaboración con el Grupo de Investigación de Teledetección del Departamento de Termodinámica de la Universidad de Valencia, *Contribución a la Climatología desde Satélites mediante la Teoría del Caos*, formado en un primer momento por Alejandro Bodas, Ernesto López-Baeza y Juan de la Rubia Pacheco. A todos ellos mi más sincero agradecimiento.

Quisiera dar las gracias también a la red de vigilancia y previsión de la contaminación atmosférica de Catalunya (XPVCAC) por ofrecerme de forma totalmente gratuita los datos que se han utilizado en el análisis.

6. REFERENCIAS

- ABARBANEL, HDI., BROWN, R., SIDOROWICH, JJ., y TSMIRING, LS. (1993): "The analysis of observed chaotic data in physical systems". *Rev. Mod. Physics*, 65, 1331-1392.
- ABARBANEL, HDI. (1996): *"Analysis of Observed Chaotic Data"*. Springer-Verlag, New York.
- ADDISON, PS. (1997): *"Fractals and Chaos"*. IOP, Bristol.
- CHEN, JL., ISLAM, S., y BISWAS, P. (1998): "Nonlinear dynamics of hourly ozone concentrations: nonparametric short term prediction". *Atmospheric Environment*, 32, 1839-1848.
- KANTZ, H. (1994): "A robust method to estimate the maximal Lyapunov exponent of a time series". *Phys. Lett. A*, 185, 77.
- RAGA, GB., y LEMOYNE, L. (1996): "On the nature of air pollution dynamics in Mexico City: Nonlinear Analysis". *Atmospheric Environment*, 30, 3987-3993.
- WARK, K., y WARNER, CF. (1997): *"Contaminación del aire. Origen y control"*. Limusa, Mexico.