

INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS
SUPERIORES DE MONTERREY

CAMPUS MONTERREY

DIVISION DE INGENIERIA Y ARQUITECTURA
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA



TECNOLÓGICO
DE MONTERREY.

APLICACION DE MODELOS SEMI-EMPIRICOS PARA
EL ANALISIS Y PRONOSTICO DE LA CALIDAD DEL AIRE EN EL
AREA METROPOLITANA DE MONTERREY, N. L.

TESIS

PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL
PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS
ESPECIALIDAD EN SISTEMAS AMBIENTALES

POR:

IGNACIO CARCIA SANCHEZ

MONTERREY, N. L.

MAYO DE 2003

**INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS
SUPERIORES DE MONTERREY**

CAMPUS MONTERREY

DIVISION DE INGENIERIA Y ARQUITECTURA

PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA



**TECNOLÓGICO
DE MONTERREY.®**

**APLICACION DE MODELOS SEMI-EMPIRICOS PARA
EL ANALISIS Y PRONOSTICO DE LA CALIDAD DEL AIRE EN EL
AREA METROPOLITANA DE MONTERREY, N. L.**

T E S I S

**PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL
PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS
ESPECIALIDAD EN SISTEMAS AMBIENTALES**

P O R :

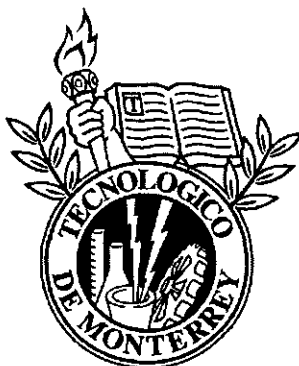
IGNACIO GARCIA SANCHEZ

MONTERREY, N. L.

MAYO DE 2003

**INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS
SUPERIORES DE MONTERREY**

**CAMPUS MONTERREY
DIVISIÓN DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERÍA**



**APLICACIÓN DE MODELOS SEMI-EMPÍRICOS PARA EL ANÁLISIS Y
PRONÓSTICO DE LA CALIDAD DEL AIRE EN EL ÁREA
METROPOLITANA DE MONTERREY, N.L.**

TESIS

**PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL
GRADO ACADÉMICO DE**

MAESTRO EN CIENCIAS

ESPECIALIDAD EN SISTEMAS AMBIENTALES

POR:

IGNACIO GARCÍA SÁNCHEZ

MONTERREY, N.L.

MAYO DEL 2003

DEDICATORIA

A Dios, por permitirme estar vivo y gozar cada momento de esta maravillosa aventura de la vida, gracias.

A mis padres, por su amor incondicional, por todos sus consejos y enseñanzas, por mostrarme que no existen las barreras y todos los sueños se pueden lograr, muchísimas gracias. Con amor, respeto y gran admiración de su hijo Nacho.

A mis hermanos, por ser mis mejores amigos, por su confianza y saber que cuento con ellos en todo momento, gracias.

A Grecia, por todos y cada uno de los momentos tan hermosos que hemos compartido juntos, por aguantarme y por entregarme ese amor tan grande y valioso para mi. Con todo mi amor.

AGRADECIMIENTOS

Al Ing. Sonia Limón del SIMA, por haberme brindado la información necesaria para la realización de este estudio, agradeciendo su amabilidad y disposición.

Al Ing. Mario Rodríguez del CNA, por facilitarme las lecturas meteorológicas empleadas en este trabajo, agradeciendo sus atenciones.

Al Dr. Alberto Mendoza, por brindarme su tiempo, experiencias y ayuda durante el desarrollo de este trabajo de tesis, gracias por todo.

Al Dr. Gerardo Mejía y al Dr. Jerónimo Martínez, por sus recomendaciones y atinados comentarios que sirvieron para el mejoramiento de este trabajo de tesis.

RESUMEN

Monterrey, N.L. se caracteriza por ser una ciudad altamente industrializada, hecho que conlleva a una serie de fuentes emisoras de contaminantes, tanto fijas como móviles. Si bien es cierto que Monterrey no ha alcanzado aún niveles de contaminación tan dramáticos como los encontrados en la Ciudad de México, resulta importante prestar atención en medidas preventivas y de alertamiento a la población respecto a niveles de contaminación que puedan llegar a afectarla de forma negativa.

Este trabajo, tiene como finalidad presentar un modelo que permita pronosticar los niveles de concentración de ozono en el Área Metropolitana de Monterrey, N.L. (AMM), partiendo de una serie de variables meteorológicas pronosticadas para el día de interés, y variables químicas del día anterior. Así, se presenta un modelo de Regresión No Lineal (RNL) y un modelo de Redes Neuronales Artificiales (RNA), calibrados ambos sobre una base de datos de 1998-2001 y evaluado su desempeño con datos del 2002. Las variables usadas por los modelos son: temperatura máxima, velocidad del viento máxima, factor de radiación solar total (RST) promedio del día, humedad relativa máxima, presión máxima, precipitación total del día, concentración máxima (ppb) de ozono del día anterior y concentraciones máximas (ppb) de NO_2 y NO_x de 15 a 23 horas del día anterior.

El desempeño se evaluó comparando las concentraciones de ozono estimadas respecto a las observadas, contabilizando el porcentaje de acierto sobre tres diferentes niveles de calidad de aire: **Buena, Moderada y Mala**. Tanto el modelo RNL como el RNA mostraron buenos desempeños en sus estimaciones sin presentar una diferencia significativa entre ambos. El modelo RNL mostró eficiencias globales del 76.2% al 83.7%, y específicas de: 52.63%, 93.33% y 71.43%, para cada uno de los niveles de calidad de aire, respectivamente. El modelo RNA mostró eficiencias globales del 75.8% al 82.8%, y específicas de: 55.55%, 86.67% y 86.71%, para cada uno de los niveles de calidad de aire, respectivamente.

En base a los resultados obtenidos por los modelos y las variables seleccionadas, se concluye que para el AMM las variables que tienen una mayor relevancia en la descripción de la formación de ozono por los modelos son: temperatura máxima, factor RST, concentración de ozono (ppb) del día anterior, velocidad del viento máxima y concentración máxima óxidos de nitrógeno (NOx y NO₂); considerando sus relaciones físicas y químicas existentes.

CONTENIDO

	Página
CAPITULO 1 INTRODUCCIÓN.	
1.1. Antecedentes.	1
1.2. Problemática de Monterrey N.L.	7
1.3. Objetivos.	8
1.4. Justificación.	9
1.5. Estructura de la Tesis.	10
CAPITULO 2 MODELOS DE PREDICCIÓN.	11
2.1. Modelos de Regresión Multivariable.	12
2.2. Modelos de Redes Neuronales Artificiales.	13
2.3. Modelos Obtenidos en Diferentes Estudios.	17
CAPITULO 3 DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA.	
3.1. Fuente de Datos.	24
3.2. Base de Datos para el Análisis.	27
3.3. Aplicación de Regresiones.	29
3.4. Desarrollo de los Modelos Pronóstico.	32
3.5. Calibración de los Modelos.	32
3.6. Evaluación del Desempeño de los Modelos.	33
CAPITULO 4 SELECCIÓN DE LAS VARIABLES PREDICTOR.	
4.1. Análisis de las Variables Meteorológicas.	34
4.2. Análisis de las Variables Químicas.	43
CAPITULO 5 MODELOS PRONÓSTICO OBTENIDOS.	
5.1. Modelo de Regresión Multivariable.	
5.1.1. Obtención del Modelo de Regresión.	46
5.1.2. Modelo Pronóstico (RNL).	53

5.1.3. Pre-evaluación del Modelo (Back-casting).	57
5.1.4. Evaluación del Desempeño en Modo Pronóstico (For-casting).	61
5.2. Modelo de Redes Neuronales.	
5.2.1. Obtención del Modelo de Redes (RNA).	64
5.2.2. Entrenamiento de la Red Neuronal.	69
5.2.3. Simulación de la Red Neuronal.	78
CAPITULO 6 DISCUSIÓN.	
6.1. Comparación con otros autores.	87
6.2. Comparación RNL vs. RNA.	91
6.3. Parámetros mas importantes en la predicción de niveles de calidad del aire en el AMM.	94
6.4. Beneficios, aplicaciones y novedades que deja el trabajo.	96
CAPITULO 7 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.	99
ANEXO I. Funciones de Redes Neuronales.	104
ANEXO II. Programas de Redes Neuronales.	110
BIBLIOGRAFÍA.	116
VITA.	119

ÍNDICE DE TABLAS

	Página
5.1 Correlación (R^2) aplicando la misma ecuación pronóstico a ambas bases de datos (Completa y Ajustada).	48
5.2 Análisis estadístico de concentración de ozono. Conjunto Ajustado correspondiente al periodo de 1998-2001.	50
5.3 Análisis estadístico de concentración de ozono. Conjunto Completo correspondiente al periodo de 1998-2001.	50
5.4 Coeficientes de regresión del modelo pronóstico (RNL) obtenidos para una regresión de años acumulados (1998-2001), con $R^2= 0.5206$	54
5.5 Matriz de correlación de los coeficientes de regresión del modelo pronóstico (RNL).	54
5.6 Incremento de correlación (R^2) al ingresar cada variable a la estructura del modelo RNL.	55
5.7 Porcentaje de certeza en los diferentes rangos de concentración de ozono (ppb) obtenidos por el modelo pronóstico (RNL) respecto a los valores observados, para cada uno de los años de 1998 al 2001.	59
5.8 Porcentaje de certeza en los diferentes rangos de concentración de ozono (ppb) obtenidos por el modelo pronóstico (RNL) respecto a los valores observados, para los años en conjunto del periodo 1998-2001.	60
5.9 Porcentaje de certeza en los diferentes rangos de calidad de aire, aplicando el modelo (RNL) con y sin incremento sobre la base de datos correspondiente al 2002.	62
5.10 Porcentaje de certeza en los diferentes rangos de calidad de aire, aplicando el modelo (RNL) con y sin incremento sobre la base de datos aleatoria correspondiente al año 2002.	64
5.11 Análisis estadístico del ozono estimado por las diferentes redes neuronales en fase de entrenamiento.	73
5.12 Correlación (R^2) entre el ozono observado y los valores de ozono estimados por las diferentes redes en fase de entrenamiento, aplicando una regresión lineal.	74

5.13	Porcentaje de aciertos de los valores de ozono estimados en fase de entrenamiento por las diferentes redes, respecto a los valores observados de ozono, para el periodo en conjunto 1998-2001.	75
5.14	Porcentaje de aciertos de los valores de ozono estimados en fase de entrenamiento por las diferentes redes aplicando un incremento de 1.3, respecto a los valores observados de ozono, para el periodo en conjunto de 1998-2001.	76
5.15	Análisis estadístico del ozono estimado por las diferentes redes neuronales en fase de simulación.	79
5.16	Correlación (R^2) entre el ozono observado y los valores de ozono estimado por las diferentes redes en fase de simulación, aplicando una regresión lineal.	80
5.17	Porcentaje de certeza de los valores de ozono estimados en fase de simulación por las diferentes redes, respecto a los valores observados de ozono, para el 2002.	81
5.18	Porcentaje de certeza de los valores de ozono estimados en fase de simulación por las diferentes redes aplicando un incremento de 1.3, respecto a los valores observados de ozono, para el 2002.	83

ÍNDICE DE FIGURAS

	Página
1.1 Formación de ozono a partir de sus precursores (Artola, 2001).	5
2.1 Red Neuronal Artificial del tipo retropropagación en multicapas con dos capas ocultas.	14
2.2 Ejemplo de una red neuronal artificial de $m \times n \times o$, mostrando una red del tipo retropropagación en multicapas con una estructura $5 \times 6 \times 1$.	15
3.1 Ubicación de las estaciones de monitoreo ambiental, en el Área Metropolitana de Monterrey (SIMA).	25
3.2 Porcentaje de días que se alcanzó o rebaso los 100 puntos IMECA de ozono por zona y por año en el AMM (INE, 1999).	28
3.3 IMECA máximo mensual de ozono en el AMM durante 1993-1998. (INE, 1999).	28
4.1 Regresión de concentración de ozono (ppb) contra la temperatura máxima (°C), para el año 2000.	36
4.2 Regresión de concentración de ozono (ppb) contra velocidad del viento (Km/hr), para el año 2000.	37
4.3 Regresión de concentración de ozono (ppb) contra factor de corrección RST, para el año 2001.	39
4.4 Regresión de temperatura (°C) contra humedad relativa (%), para el año 2000.	40
4.5 Regresión de concentración de ozono (ppb) contra humedad relativa(%), para el año 2000.	40
4.6 Regresión de concentración de ozono (ppb) contra presión (mbar), para el año 2000.	42
4.7 Regresión de concentración de ozono (ppb) contra precipitación (mm), para el año 1999.	43
4.8 Regresión de concentración de ozono (ppb) contra ozono del día anterior (ppb), para el año 2001.	44

4.9	Regresión de concentración de ozono (ppb) contra concentración máxima de NO ₂ 15 a 23 hrs. (ppb) del día anterior <i>Izquierda</i> , y contra concentración máxima de NO _x 15 a 23 hrs. (ppb) del día anterior <i>Derecha</i> , para el año 2001.	45
5.1	Curvas de frecuencia de concentraciones de ozono, correspondientes para el <u>conjunto ajustado</u> . <i>Izquierda</i> ozono observado, <i>Derecha</i> ozono pronóstico.	52
5.2	Relación entre valores de concentración de ozono observado (ppb) respecto a concentraciones de ozono pronosticado (ppb), aplicando una regresión lineal.	56
5.3	Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb), para el periodo 1998-2001.	56
5.4	Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) <u>sin incremento</u> , para el año 2002.	63
5.5	Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) <u>con incremento</u> , para el año 2002.	63
5.6	Esquema de una red de retropropagación del tipo Feed-forward, con una estructura de 9 x 6 x 1 (entrada x oculta x salida).	68
5.7	Relación entre valores de concentración de ozono (ppb) respecto a concentraciones pronosticadas (ppb) con la red R6 en fase de entrenamiento, aplicando una regresión lineal.	74
5.8	Relación entre valores de concentración de ozono (ppb) respecto a concentraciones pronosticadas (ppb) con la red R6 en fase de entrenamiento con incremento de 1.3, aplicando una regresión lineal.	77
5.9	Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) en la fase de entrenamiento para la Red Neuronal R6 (sin incremento), correspondiente al periodo 1998-2001.	78
5.10	Relación entre valores de concentración de ozono (ppb) respecto a concentraciones pronosticadas (ppb) con la red SR8 en fase de simulación, aplicando una regresión lineal.	80
5.11	Relación entre valores de concentración de ozono (ppb) respecto a concentraciones pronosticadas (ppb) con la red SR4 en fase de simulación con incremento de 1.3, aplicando una regresión lineal.	84

5.12 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) <u>sin incremento</u> aplicando la red SR4, para el año 2002.	85
5.13 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) <u>con incremento</u> aplicando la red SR4, para el año 2002.	85
5.14 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) <u>con incremento</u> aplicando la red SR8, para el año 2002.	86

CAPÍTULO 1.

INTRODUCCIÓN.

1.1. Antecedentes.

La contaminación del aire forma parte de la vida moderna, siendo la combustión la causa principal de la contaminación atmosférica. Las impurezas del combustible, una incorrecta relación aire-combustible, o temperaturas de combustión inadecuadas son causa de la formación de productos como monóxido de carbono, óxidos de azufre, óxidos de nitrógeno, cenizas e hidrocarburos no quemados –todos ellos son contaminantes del aire (Wark y Warner, 2000).

Entre las características más molestas de la vida en las áreas metropolitanas de países industrializados está la presencia frecuente del neblumo. Neblumo es el nombre que usualmente se le da a aquella forma de contaminación del aire que se origina de la interacción de la luz solar con óxidos de nitrógeno, óxidos de azufre, peróxidos de hidrógeno, nitrato de peroxiacetilo (NAP), entre otros. El neblumo se caracteriza químicamente por un nivel relativamente alto de oxidantes que irritan ojos y garganta, dañan plantas, entre otros. Los olores y la disminución de la visibilidad son también característicos de las condiciones del neblumo (Wark y Warner, 2000).

En ciudades como México, principalmente en la Zona Metropolitana del Valle de México (p. ej. Beaton *et al.*, 1992; Blake *et al.*, 1995; Bravo y Torres, 2000; Schifter *et al.*, 2000a) , se ha investigado los orígenes y posibles soluciones a la contaminación del aire, aunque algunas otras zonas del país que también están experimentando ya los síntomas de una problemática existente han recibido menos atención. Las zonas metropolitanas de Guadalajara, Monterrey, Toluca y la región del Bajío son algunas de las áreas donde se han enfocado recursos con el fin de comenzar a comprender las causas de la problemática y su relativo grado de deterioro de la calidad del aire (p. ej. Bishop *et al.*, 1997; INE, 1998; Schifter *et al.*, 2000b).

De los diferentes contaminantes existentes en atmósferas urbanas, se ha prestado una mayor atención a las siguientes seis especies químicas: ozono (O_3), monóxido de carbono (CO), bióxido de nitrógeno (NO_2), bióxido de azufre (SO_2), partículas con diámetros aerodinámicos menores a 10 micrómetros (PM_{10}), y plomo (Pb). Su atención se ha debido básicamente a su alto grado de afectación a la salud humana y sus múltiples reacciones en la atmósfera.

De los contaminantes antes mencionados, el ozono troposférico (el ozono al nivel del suelo se denomina ozono troposférico debido a que se encuentra en la troposfera o zona inferior de la atmósfera), es el principal constituyente de un tipo de contaminación atmosférica conocida como "SMOG FOTOQUIMICO".

El ozono esta presente en la troposfera de forma natural. Una parte proviene del existente en las capas altas de la atmósfera (estratósfera) que es transportado hacia niveles más bajos, a las capas de aire próximas a la superficie terrestre. Otra parte procede de procesos naturales que tienen lugar en la biósfera y que dan lugar a la formación de ozono, a partir de emisiones de óxidos de nitrógeno que tienen su origen en procesos biológicos y en la emisión de compuestos orgánicos volátiles procedentes de la vegetación, de procesos de fermentación o de los volcanes (Nebel y Wright, 2000).

Muchas actividades de las que realiza el hombre en la actualidad emiten contaminantes a la atmósfera; siendo los contaminantes más importantes que influyen en la formación de ozono los óxidos de nitrógeno (NO_x) y los compuestos orgánicos volátiles (VOCs). Se les suele llamar "precursores", y son contaminantes primarios, pues son emitidos como tales, al contrario que el ozono, que es un contaminante secundario, ya que se forma a partir de los primarios (Seinfeld y Pandis, 1998).

Como el proceso requiere de la luz solar, es en primavera y verano cuando típicamente se alcanzan las máximas concentraciones de ozono troposférico. Al aumentar su concentración, el ozono se convierte en un contaminante que afecta a la salud de las personas.

El ozono penetra por las vías respiratorias y debido a sus propiedades altamente oxidantes provoca la irritación de las mucosas y los tejidos pulmonares.

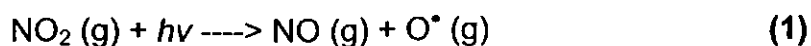
Los principales efectos observados son: irritación de los ojos, tos, dolor de cabeza, dolores en el pecho, etc., pudiendo llegar, cuando las concentraciones son muy elevadas, a provocar inflamaciones pulmonares afectando gravemente a la función respiratoria.

Las personas que más riesgo corren son aquellas con alguna enfermedad pulmonar, entre las que se encuentran los asmáticos (enfermedad muy extendida en primavera debido a las reacciones alérgicas), ancianos y niños; así como también se podrán ver afectadas aquellas personas que realizan ejercicio físico al aire libre. Debido a que, como ya se ha dicho, las reacciones que producen el ozono se activan por la acción de la luz solar, las horas en que la concentración de ozono en el aire es más alta son aquellas que van desde el medio día hasta las primeras horas de la tarde. Los factores meteorológicos y topográficos también afectan la generación de ozono. Así, la lluvia puede eliminar de la atmósfera los contaminantes que originan la contaminación por ozono y el viento puede arrastrar y dispersar los contaminantes. Si las ciudades están rodeadas por montañas o colinas, el aire puede quedar atrapado y los niveles de ozono aumentan (Seinfeld y Pandis, 1998).

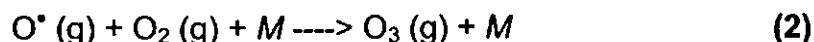
Pero el ozono no sólo es perjudicial para el hombre, también lo es para el resto de los seres vivos. Por ejemplo, es altamente tóxico para las plantas. Afecta a las paredes celulares, disminuye la actividad fotosintética y perjudica su crecimiento, provocando una disminución de la vegetación natural y de la producción agrícola (Nebel y Wright, 2000).

En las grandes ciudades y en sus proximidades, la alta densidad de población y de industrias hace que la contaminación del aire, generalmente proveniente de procesos de combustión, como los de los motores de los automóviles, sea muy alta. Entre los agentes contaminantes se encuentran los óxidos de nitrógeno. Estos resultan muy reactivos, generando un ciclo fotocíclico y con esto la formación de ozono en la troposfera (Seinfeld y Pandis, 1998).

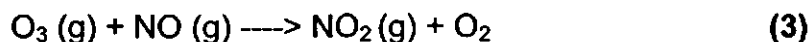
El proceso comienza cuando el dióxido de nitrógeno, por acción de la luz solar, se descompone en monóxido de nitrógeno y oxígeno monoatómico (altamente reactivo) (Wark y Warner, 2000):



A su vez, el oxígeno atómico se combina con el O₂ (en presencia de un tercer cuerpo) para formar ozono mediante la siguiente reacción:



El ozono generado, puede oxidar el monóxido de nitrógeno y generar dióxido de nitrógeno, para con esto continuar el ciclo fotolítico:



Este ciclo fotolítico, ocurre de forma natural en el ambiente, sin embargo las especies indicadas en el ciclo interactúan con otras especies presentes en la atmósfera (ej. hidrocarburos); tal que, la cantidad de ozono observado en las atmósferas urbanas, comparándola con la cantidad pronosticada por el ciclo fotolítico del dióxido de nitrógeno, sólo sería posible si se pudiera establecer un mecanismo alternativo para la oxidación de NO a NO₂.

El mecanismo alternativo para oxidar el NO fuera del ciclo fotolítico es el ingreso de los hidrocarburos en la fotoquímica atmosférica. La presencia de hidrocarburos incrementa en gran medida la complejidad de las reacciones atmosféricas, aumentando con esto las concentraciones de ozono en el medio.

Al ingresar los hidrocarburos, una parte de oxígeno atómico formado por la reacción (1) es capaz de reaccionar con los diferentes compuestos orgánicos para formar radicales libres (ej. R[•], RO[•], HCO[•]). Estos radicales podrán reaccionar con el oxígeno molecular para generar nuevos radicales (ej. radicales peróxido), de acuerdo a la siguiente reacción (Wark y Warner, 2000):



Estos radicales son capaces de oxidar el NO a NO₂ sin descomponer O₃ por medio de la reacción:



Por tanto, las reacciones de este tipo con hidrocarburos aumentan la producción de NO₂, más allá de lo formado por el ciclo fotolítico del dióxido de nitrógeno. Esto dará por resultado que la concentración de ozono incremente al afectar el consumo de O₃ por el NO (reacción 3).

En la figura 1.1. se muestra de forma general la formación de ozono a partir de sus precursores, ilustrando las diferentes fuentes contaminantes y sus interacciones en una atmósfera urbana.

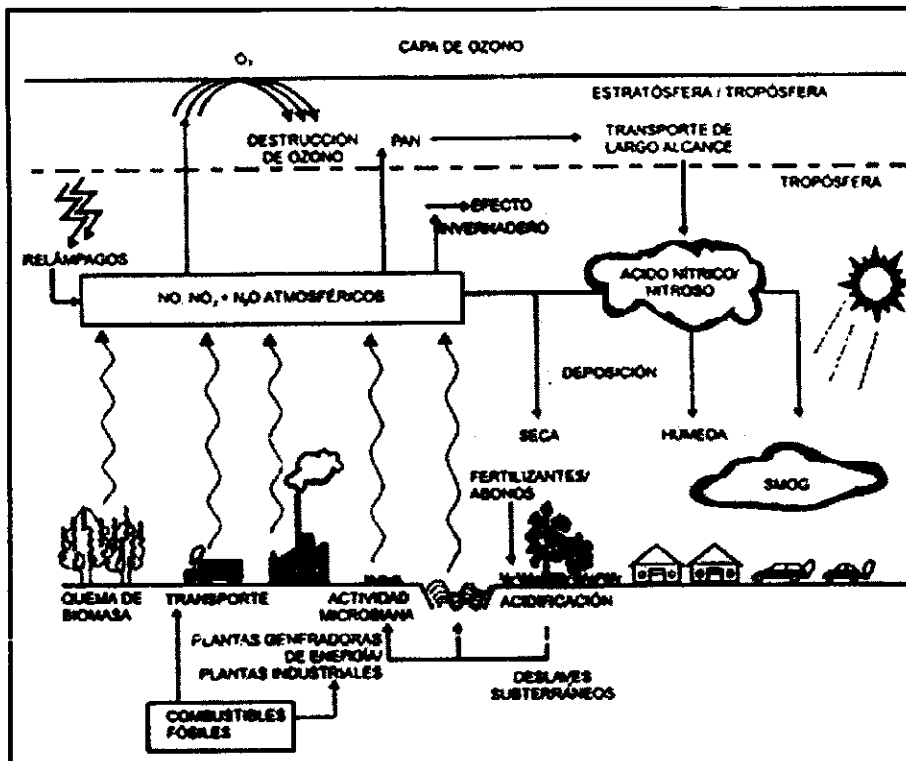


Figura 1.1. Formación de ozono a partir de sus precursores (Artola, 2001).

Debido a la problemática que representan los contaminantes atmosféricos (ozono), se han encaminado numerosos esfuerzos en determinar como evolucionan los contaminantes en las cuencas atmosféricas, así como los puntos de mayor impacto, principalmente en materia de salud.

El progreso en la determinación de dicha evolución de los contaminantes, se ha dado en una medida importante gracias a los avances logrados en los modelos matemáticos que describen la emisión, transporte, y formación y desaparición por mecanismos físicos y químicos de los contaminantes atmosféricos, y por la factibilidad de obtener cada vez más recursos computacionales para aplicar dichos modelos. Estos modelos tienen como una de sus características poder relacionar la calidad del aire con algunos otros

parámetros característicos de las cuencas atmosféricas, como lo serían los niveles de emisión y condiciones meteorológicas (Russell y Dennis, 2000).

En la actualidad existen diferentes modelos para explicar y/o entender los procesos que gobiernan la generación, transporte y destino de los contaminantes atmosféricos; sin embargo dada la complejidad del medio, estos modelos difícilmente cubren en su totalidad las diferentes rutas y mecanismos tanto químicos como físicos que se dan de manera natural en la atmósfera.

Los modelos generados, muchas veces son específicos para un sector industrial, estatal y/o municipal; siendo algunas de sus premisas para su implementación el grado de eficiencia del modelo, la complejidad del mismo, disponibilidad de datos para su alimentación y análisis, así como de los requerimientos tecnológicos y de capital humano para su óptima ejecución.

En general existen dos grandes grupos de modelos. Por un lado tenemos los modelos determinísticos (Roth, 1999; Pun *et al.*, 2000), caracterizados por ser complejos, de altos requerimientos de información y soporte computacional, que muchas veces resultan prohibitivos en costos o acceso a la información adecuada; tal que su ejecución no siempre augura un buen resultado. El segundo grupo, conocido como modelos semi-empíricos, caracterizados por tener requerimientos computacionales y de información más modestos, buscando entre otras cosas poder determinar las tendencias de la calidad del aire, obtener pronósticos ambientales e incrementar el conocimiento de los mecanismos que gobiernan la calidad del aire. Los modelos semi-empíricos más empleados son: Regresión multivariable de tipo lineal y no lineal, Redes neuronales artificiales, Series de tiempo y análisis espectral.

Este trabajo, tiene como finalidad presentar un modelo que permita pronosticar los niveles de concentración de ozono en el Área Metropolitana de Monterrey, N.L. (AMM), partiendo de una serie de variables meteorológicas y químicas pronosticadas para el día de interés. El modelo a desarrollar, será de tipo semi-empírico, buscando que éste muestre un desempeño adecuado al hacer las estimaciones. Se presentará un análisis comparativo entre un modelo estadístico de Regresión multivariable de tipo no lineal (RNL) y uno generado empleando

Redes neuronales artificiales (RNA); siendo ambos calibrados con la misma base de datos y evaluada su eficiencia para las mismas fechas.

1.2. Problemática de Monterrey N.L.

Monterrey N.L. se caracteriza por ser una ciudad altamente industrializada, hecho que conlleva a una serie de fuentes emisoras de contaminantes, tanto fijas como móviles.

El Área Metropolitana de Monterrey (AMM), cuenta con un Sistema de Monitoreo Ambiental (SIMA), que consta de cinco estaciones fijas de monitoreo ambiental (noroeste, suroeste, centro, sureste y noreste) iniciando sus operaciones en 1993, con la finalidad de contar con información continua de los niveles de contaminación en el AMM. Los contaminantes monitoreados por el SIMA son: O₃, NO_x, NO, NO₂, CO, SO₂ y PM₁₀. Así como diferentes parámetros meteorológicos.

Si bien es cierto, que Monterrey no ha alcanzado aún niveles de contaminación tan dramáticos como los encontrados en la Ciudad de México, resulta importante prestar atención en medidas preventivas y de alertamiento a la población respecto a niveles de contaminación que puedan llegar a afectar de forma negativa, dado el nivel tan acelerado de crecimiento tanto industrial como demográfico que experimenta esta ciudad.

Por lo que, resulta importante emplear la información disponible en el área metropolitana, para de alguna manera poder entender mejor los mecanismos de generación, transporte y rutas de impacto a la salud por parte de los contaminantes. Para con esto poder tomar las medidas adecuadas en el tiempo preciso, adelantándonos a escenarios no deseados y sobre todo contar con un ambiente adecuado para una buena calidad de vida.

1.3. Objetivos.

Objetivo General

Hacer uso de técnicas Semi-empíricas, para obtener modelos que permitan el análisis y pronóstico de la calidad de aire (O_3) en el Área Metropolitana de Monterrey (AMM).

Objetivos Específicos

a) Obtener un modelo estadístico de regresión multivariable de tipo no lineal (RNL), que describa el comportamiento general de la contaminación atmosférica en el AMM.

b) Optimizar un modelo de red neuronal artificial (RNA), que describa el comportamiento general de la contaminación atmosférica en el AMM.

c) Calibrar los modelos de RNL y de RNA, para que operen en modo de pronóstico, mediante la incorporación de parámetros meteorológicos y químicos, los cuales provendrán de pronósticos de otras fuentes.

d) Aplicar los modelos obtenidos en los incisos a, b y c en su modo de pronóstico bajo condiciones reales, con la finalidad de evaluar su desempeño.

e) Dilucidar los parámetros más importantes para la formación de contaminantes atmosféricos en el AMM, basándose en los modelos generados.

Alcance

La generación de los modelos Semi-empíricos presentados en este trabajo, resultan del tratamiento y selección de diferentes variables tomadas de parámetros ambientales y meteorológicos, otorgados por el SIMA y Comisión Nacional del Agua (CNA), para el periodo de 1998 al 2001 en el AMM. La evaluación del desempeño de los modelos se logrará al comparar los resultados pronosticados (concentraciones de ozono) con los observados de Enero a Noviembre del 2002, siendo estos últimos otorgados por las instituciones antes mencionadas.

La finalidad de los modelos será, entre otras cosas, el poder hacer un estimado de la concentración de ozono para un día de interés en el AMM, tomando en consideración la circulación de los vientos reinantes y estructura de la cuenca atmosférica particular en el área. En caso de querer aplicar los modelos generados a otro lugar, se tendrán que tomar las consideraciones y adecuaciones prudentes, para obtener un buen desempeño de los mismos; a sabiendas de que posiblemente la estructura de los modelos sea muy específica o particular para el AMM.

1.4. Justificación.

El desarrollo de este proyecto, tiene entre sus beneficios, la capacidad de pronosticar por medio del modelo si los niveles de contaminación en una región determinada serían excedidos, basados en monitoreos ambientales de días previos y pronósticos de parámetros meteorológicos para el día de interés. Este punto no solo resulta básico para tomar medidas preventivas y alertamiento a la población de un área determinada, a la postre serviría para tomar medidas de control que reduzcan el grado de afectación "tóxica" de los contaminantes a la población. Otro beneficio importante, es el poder dilucidar los parámetros y condiciones más importantes, tanto climáticas como químicas, que gobiernan la calidad del aire en Monterrey, siendo estos consistentes con los conocimientos que se tienen actualmente.

Los modelos obtenidos, tendrán requerimientos computacionales modestos y de fácil implementación, el software empleado para su desarrollo (Microsoft Office 2000, SPSS v.10.0 y MATLAB v.6.0) es comercial y accesible.

La estructura de los modelos es sencilla y de fácil entendimiento, lo que le confiere costos de operación mínimos, tanto de equipo como de personal para su operación. Estos modelos podrán ser calibrados en diferentes periodos, esperando con esto que su confiabilidad y desempeño incrementen.

1.5. Estructura de la Tesis.

La tesis se compone de 7 capítulos, correspondiendo el Capítulo 1 a la Introducción.

En el Capítulo 2, se explican de las características de los diferentes tipos de modelos, así como de trabajos que han desarrollado diversos investigadores en este campo, centrándose en modelos Semi-empíricos (Modelos de Regresión Multivariable y Redes Neuronales Artificiales) para la predicción de ozono.

El Capítulo 3, aborda los pasos para la realización de esta tesis, partiendo de la fuente de datos, desarrollo y calibración de los modelos pronóstico, hasta la evaluación del desempeño de los mismos.

En el Capítulo 4, se explica el mecanismo de selección de las variables para el modelo tanto meteorológicas como químicas, señalando la importancia de cada una de ellas y la relación y/o función que guardan en la estimación de la concentración de ozono.

El Capítulo 5, muestra la estructura de los modelos, resultados y técnica de calibración, así como el desempeño de ambos (RNL y RNA).

Para el Capítulo 6, se hace un análisis de los resultados, comparación entre modelos y eficiencias alcanzadas bajo condiciones reales, se discute sobre los parámetros que se consideraron relevantes para la formación del ozono en el AMM, estructura de la base de datos, homogeneidad o disparidad de las concentraciones de ozono a lo largo del periodo de estudio (1998-2001), fortalezas y debilidades de los modelos, entre otro puntos.

Por último, en el Capítulo 7 se mencionan las conclusiones a las que se llega en este trabajo de tesis, el cumplimiento de los objetivos establecidos y se dan recomendaciones para la aplicación de los modelos en otros estados, mejoras en el modelo y aspectos a considerar para trabajos futuros en este tema.

CAPÍTULO 2.

MODELOS DE PREDICCIÓN.

En la última década se ha visto un crecimiento en el desarrollo de modelos atmosféricos que permitan aplicar una serie de técnicas estadísticas a un grupo de variables (meteorológicas, dispersión, químicas, etc.) para tratar de estimar o pronosticar los niveles de contaminación (ej. concentración de ozono) que se pudiesen presentar en una cierta región.

Partiendo de este interés, surge un grupo de modelos de pronóstico conocidos como “*modelos Semi-empíricos*”. Este tipo de modelos tiene entre sus características, requerimientos de información modesta y de un acceso a la información relativamente sencillo; pero con la suficiente calidad para poder llegar a ser útiles en el estudio de la contaminación atmosférica. Para la generación de los modelos, en general, se hace uso de técnicas estadísticas de regresión o ajuste de datos mediante técnicas numéricas para establecer las condiciones ambientales, basándose en datos históricos de diversos parámetros (meteorológicos y químicos) medidos rutinariamente.

Los modelos Semi-empíricos tienen como principales objetivos: (a) obtención de pronósticos ambientales, (b) investigar y estimar las tendencias de la calidad del aire, y (c) incrementar el entendimiento científico de los mecanismos que gobiernan la calidad del aire (Thompson, *et. al.*, 2001). El logro de estos objetivos podrá ser influenciado tanto por una apropiada selección de los métodos estadísticos, así como la elección de información apropiada.

En este grupo de modelos se cuenta con diferentes tipos de técnicas que han sido, y continúan siendo estudiadas, para relacionar la calidad del aire en una zona determinada. Dentro de las técnicas que han sido empleadas con mayor frecuencia tenemos tres: Regresión multivariable de tipo lineal y no lineal, Redes neuronales artificiales, Series de tiempo y análisis espectral. Cada una de estas técnicas tiene sus propias implicaciones y cualidades, por lo que se han realizado

diferentes comparaciones (Comrie, 1997; Soja y Soja, 1999) entre las técnicas antes mencionadas con la finalidad de encontrar similitudes y ventajas entre ellas.

En este capítulo se describirán dos técnicas de modelos Semi-empíricos (modelos de regresión multivariable y redes neuronales artificiales), donde se presentará su fundamento, estructura, así como algunos de los estudios desarrollados por diferentes investigadores en el tema; teniendo con esto un panorama general de los modelos obtenidos en este trabajo.

Los modelos pronóstico obtenidos para el AMM, en su momento serán comparados en cuanto a sus eficiencias. En el desarrollo de éstos se partió de algunos de los parámetros y/o metodología que diversos investigadores han empleado, pero teniendo nuestros modelos la cualidad de englobar en su estructura tanto variables meteorológicas como químicas en la predicción de ozono.

2.1. Modelos de Regresión Multivariable.

Los modelos de regresión multivariable, pretenden entre otras cosas, poder describir la relación de la calidad del aire (para este estudio el nivel de ozono) y una serie de variables tanto meteorológicas, como químicas, teniendo el modelo de manera general la siguiente forma:

$$\hat{C}_{O_3} = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) + \varepsilon \quad (6)$$

Donde C_{O_3} es el valor estimado de la concentración de ozono como función de N parámetros, denotados cada uno como x_i , y ε es el error del modelo, el cual representa el hecho de que el modelo no puede explicar toda la variación observada en C_{O_3} . La cuestión fundamental es determinar cual es la forma de la función f que describe de la mejor manera posible la relación entre C_{O_3} y los parámetros x_i . Así mismo, es importante determinar que parámetros son relevantes en el modelo, esto es, proveen de información para describir la variación de C_{O_3} .

Básicamente existen dos grupos de modelos dentro de la regresión multivariable, uno de ellos pertenece a modelos de regresión lineal (RL) y el segundo correspondiente a modelos de regresión no lineal (RNL). El primero de ellos, como su nombre lo indica resulta de la relación lineal entre el valor estimado de concentración de ozono C_{O_3} , y una serie de combinaciones lineales de los parámetros:

$$\hat{C}_{O_3} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_3 x_3 + \dots + \beta_N x_N + \varepsilon \quad (7)$$

donde β_i representa los coeficientes de regresión. Los modelos de regresión no lineal, es decir, donde existen relaciones no lineales entre los parámetros del modelo, son de los más empleados en las estimaciones de la calidad del aire; debido a que las relaciones entre las concentraciones de los contaminantes atmosféricos con los parámetros físicos y químicos son altamente no lineales, lo que presupone que los modelos no lineales resulten superiores en sus estimaciones, respecto a los lineales.

2.2. Modelos de Redes Neuronales Artificiales.

Una red neuronal, computacionalmente hablando, es un conjunto de unidades procesadoras interconectadas entre ellas. Cada unidad procesadora o neurona recibe los estímulos de ciertas unidades procesadoras, realiza un cierto proceso, y manda su propia señal a su vez a otras procesadoras. La señal que emite depende de la entrada neta recibida y de una función de activación (en general no lineal) que opera sobre dicha entrada neta. La manera en que este sistema es capaz de "aprender" es modificando paulatinamente la fuerza de las conexiones entre unidades procesadoras. Se pueden incluso eliminar o crear nuevas conexiones durante el proceso de aprendizaje (Demuth y Beale, 2000).

Los modelos neuronales computacionales surgen a partir del modelo neuronal biológico y por esto sus principios estructurales y modo de operación tienen gran analogía biológica. Las redes neuronales se comportan como

procesos energéticos en donde se garantizan los mínimos de energía, es decir, la convergencia siempre a una solución. La red neuronal es capaz de encontrar siempre una respuesta de salida (no se cicla eternamente), aún cuando ésta no sea la solución correcta (Demuth y Beale, 2000).

Existen varios tipos de redes neuronales artificiales (RNA). Dentro del área de las ciencias atmosféricas. Las RNA del tipo de Retropropagación en multicapas han sido las que han demostrado ser las más útiles (Gardner y Dorling, 1998). Este tipo de RNA consiste en un sistema de neuronas (o nodos) con interconexiones simples, como se ilustra en la figura 2.1. Esta estructura es en esencia un modelo que representa un mapeo no lineal entre el vector de alimentación $\mathbf{i} = [i_1, i_2, i_3]$ y el vector de salida $\mathbf{o} = [o_1, o_2, o_3]$. Los nodos se conectan mediante pesos y señales de salida las cuales son función de la suma de señales de entrada al nodo modificadas por una función de transferencia no lineal. Es esta superposición de muchas funciones de transferencia no lineales lo que permite a este tipo de RNA aproximar relaciones extremadamente no lineales (como es el caso de las que se dan en la atmósfera en lo que se refiere a calidad del aire) entre el vector de alimentación y el vector de salida.

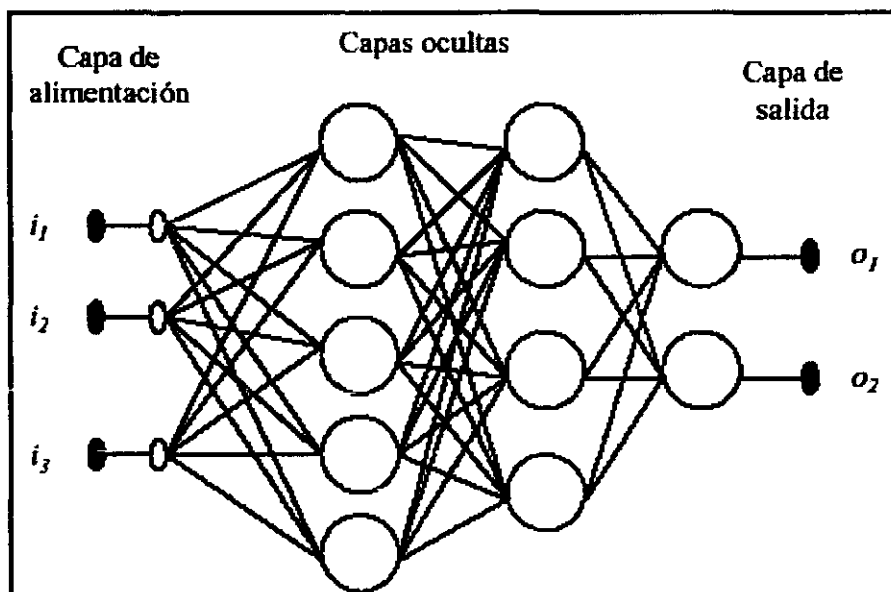


Figura 2.1. Red Neuronal Artificial del tipo retropropagación en multicapas con dos capas ocultas.

En la figura 2.2 se puede apreciar una estructura de red en multicapas típica, donde cada nodo B_j ($j = 1, 2, \dots, n$) en la capa de transferencia, es calculado como se muestra en la ecuación 8:

$$B_j = \sum_{i=1}^m w_{ij} A_i + w_{0j} A_0 \quad (8)$$

con nodos de entrada A_i ($i = 1, 2, \dots, m$) y pesos w_{ij} entre los nodos A_i y B_j . Un cálculo similar se hace entre la capa de transferencia y la de salida para cada C_k ($k = 1, 2, \dots, o$), empleando un nuevo peso w_{jk} entre los nodos B_j y C_k .

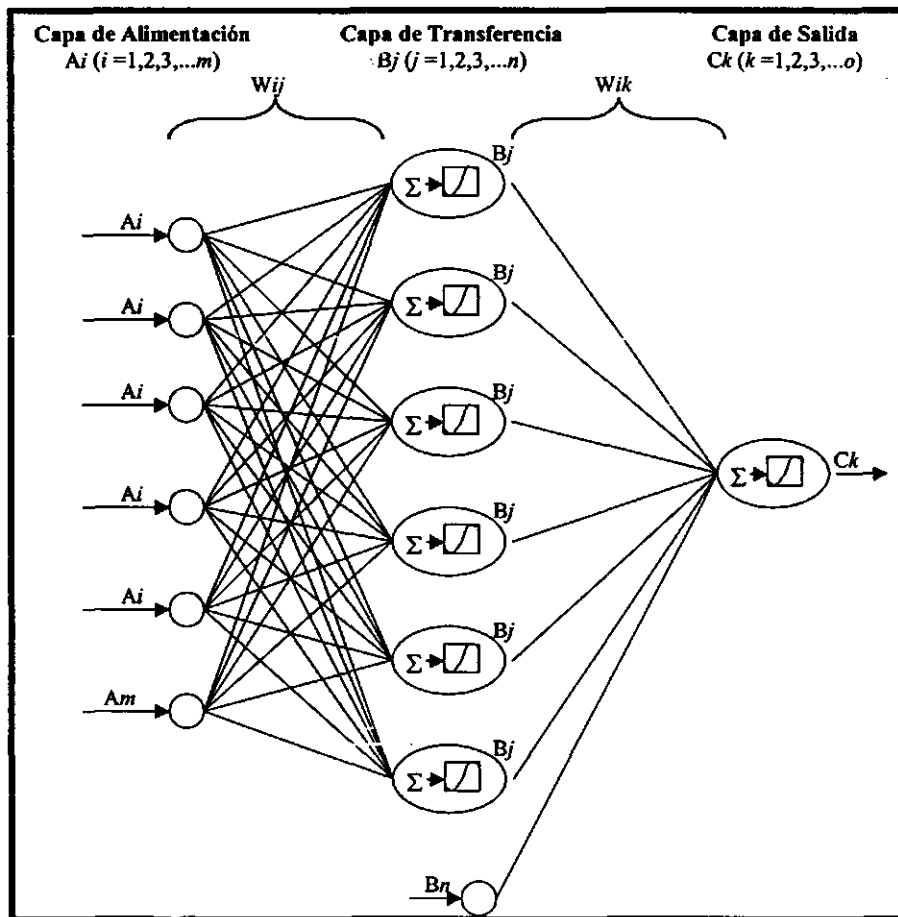


Figura 2.2. Ejemplo de una red neuronal artificial de $m \times n \times o$, mostrando una red del tipo retropropagación en multicapas con una estructura 5 x 6 x 1.

Cada valor en el nodo (B_j o C_k) es subsecuentemente calculado con una función de transferencia, siendo esta generalmente no lineal de tipo Log-Sigmoidal, de la siguiente forma:

$$\sigma(u) = \left[\frac{1}{1 + e^{-u}} \right] \quad (9)$$

donde $u = B_j$ (o C_k), tal que, los valores obtenidos en la capa de transferencia al aplicar la función corresponderán a los valores de entrada de la capa siguiente. No linealidades son incorporadas dentro de la red por medio de las funciones de transferencia y activación en cada nodo. La complejidad en los datos es capturada dependiendo el número de nodos principalmente en la capa de transferencia. Los pesos son determinados por iteraciones para obtener el menor error en la salida, por ejemplo, raíz cuadrada de la suma de los cuadrados de los errores (RMSE):

$$RMSE = \left\{ \left[\sum_{l=1}^p \sum_{k=1}^o (C_{kl} - T_{kl})^2 \right] p^{-1} \right\}^{0.5} \quad (10)$$

donde C_{kl} es el valor (predicción) de salida de la red neuronal por un patrón de entrenamiento l (ej., entrada de valores observados A_l) de p patrones de entrenamiento, y T_{kl} es el complemento o pareja (observados) de patrones de entrenamiento de salida. Los pesos iniciales son asignados al azar; en iteraciones subsecuentes, los pesos individuales se incrementan y ajustan para reducir el error (ej. algoritmos de retropropagación). Para evitar una sobreconexión en los datos, las redes neuronales generalmente son entrenadas con un subgrupo de los datos de entradas y salidas para determinar los pesos, y subsecuentemente se hace la validación con los datos restantes (cuasi-independientes), para con esto evaluar que tan bien realiza las predicciones. La aplicación de este tipo de redes y una descripción más detallada se muestra en el capítulo 5 de este trabajo, sección 5.2.

2.3. Modelos Obtenidos en Diferentes Estudios.

Hubbard y Cobourn (1998), desarrollaron un modelo de regresión para pronosticar la concentración de ozono troposférico en Louisville, KY. En dicho estudio se emplearon diferentes parámetros meteorológicos, entre los que destacan por su importancia en la formación de picos de concentración de ozono los siguientes:

Temperatura máxima donde se encontró que la mejor transformación para el pronóstico de ozono, se logra con una ecuación polinomial de cuarto orden.

Velocidad del viento donde se aplica una función de decaimiento exponencial, así como un elemento no lineal (aplicando Marquard-Levenberg).

Transmitancia Atmosférica considerando la intensidad de radiación solar que recibe la tierra, con un ajuste en el ángulo de incidencia y el ángulo del zenit, encontrando un valor de $R^2 = 0.063$ respecto a la concentración de ozono.

Temperatura mínima para hacer un ajuste entre temperatura máxima en el horario fotolítico y la temperatura mínima.

Cobertura de Nubes aplicando una adaptación que aplican los meteorólogos para reducir el error de lectura subjetivo a la lectura visual.

Precipitación mencionando que esta variable puede reducir la concentración de ozono a 10-20ppb en pocos minutos, por lavar dicho contaminante.

Calmas considerando esta variable a velocidades de viento menores a 3mph, considerándolas desde la media noche hasta las 4:00 AM.

Día de la semana por encontrar concentraciones máximas de ozono los fines de semana (Sábado y Domingo), básicamente por los patrones de conducta antropogénicos.

Aplicando a las variables antes mencionadas diferentes regresiones en el área de Louisville, llegaron a una ecuación de regresión múltiple que consiste en un intercepto y 10 coeficientes de regresión; 8 variables (el orden de las variables

en la ecuación, corresponde al orden de variables anteriormente listadas) y un parámetro no lineal.

$$\hat{Y} = B_0 + B_1X_1 + B_2X_1^2 + B_3X_1^4 + B_4 \exp(\theta X_2) + B_5X_3 + B_6X_4 + B_7X_5 + B_8X_6 + B_9X_7 + B_{10}X_8 \quad (11)$$

La correlación obtenida bajo este modelo fue de $R^2=0.670$ a 0.70 para el periodo comprendido del 1° de Mayo al 31 de Septiembre (este periodo es conocido como estación de ozono, ya que en estos meses por lo regular se alcanzan las concentraciones máximas de ozono en el ambiente, dadas las condiciones meteorológicas presentes como alta temperatura, cielos despejados y buena incidencia lumínica, entre otras), para los años 1993-1996 en Louisville, KY. La validación del modelo se realizó comparando las concentraciones de ozono observado contra el pronóstico (517 lecturas de datos), estableciendo 4 escenarios de calidad ambiental, siendo los siguientes: Buena ($[O_3] \leq 60$ ppb), moderada ($60 \text{ ppb} < [O_3] \leq 95$ ppb), próximo a insalubre ($95 \text{ ppb} < [O_3] \leq 120$ ppb), e insalubre ($[O_3] > 120$ ppb). Tal qué, para el periodo examinado el 72% de los datos pronosticados fue correcto (comparando con el ozono observado); mientras que por categoría de calidad ambiental se encontró: 74% correcto para el rango de 0-60 ppb, 80% correcto de 61-95 ppb, 40% correcto en el intervalo de 96-120 ppb y 0% correcto para concentraciones superiores a las 120 ppb.

En el estudio se hace referencia a trabajos como el de *Cox y Chu (1993)* en el que aplican como variables para el pronóstico de ozono, la temperatura máxima (asociación positiva), velocidad de viento promedio por la mañana (7-10 AM) y por la tarde (1-4 PM) (asociación negativa), humedad relativa promedio (10 AM-4 PM) (asociación regularmente negativa), cobertura de nubes (asociación negativa) y altura de mezclado en la mañana (asociación negativa). *Wolf y Liroy (1978)* emplearon como variables predictor: temperatura máxima del día anterior y del día a pronosticar, el recíproco de la velocidad media del viento medida desde la superficie hasta los 1000 m y concentración de ozono del día anterior. *Ryan y Luebehusen (1996)* incorporaron 10 variables predictor para el mismo fin, siendo: concentración máxima de ozono del día anterior, temperatura máxima, humedad

relativa, velocidad del viento por la mañana y tarde, velocidad del viento medida a 850 mbar, temperatura máxima, cobertura de nubes y longitud del día. Como estos estudios presentados existen otros en el tema.

Cobourn, Docline y Hubbard (2000), hacen una comparación de modelos de predicción de ozono, entre regresiones no lineales (RNL) y redes neuronales (NN). Este estudio tiene como punto de partida, lo encontrado en 1998 por Hubbard y Cobourn.

Se determinó un modelo de RNL que consiste en un intercepto, 13 coeficientes de regresión y 9 variables independientes: cobertura de nubes (CC), día de la semana (DOW), longitud del día (LOD), número de calmas (NC), precipitación (RF), parámetros de trayectoria de masa de aire (TRAJ), temperatura máxima (TMAX), velocidad del viento (WS) y humedad relativa (RH):

$$C_{O_3} = b_0 + b_1CC + b_2DOW + b_3LOD + b_4NC + b_5RF + b_6TRAJ + b_7 \left\{ \theta_1 + (\theta_2 + \theta_3TMAX + \theta_4TMAX^2) \exp(\theta_5WS) \right\} \exp(\theta_6RH) \quad (12)$$

Para el modelo NN se aplicaron tres capas en la red, con sus respectivas interacciones por nodos, donde en cada uno de estos se empleó una función sigmoïdal. Las capas correspondientes fueron la de entrada, intermedia y la de salida. De las nueve posibles variables de entrada, solo se tomaron seis para este modelo, siendo: temperatura, velocidad del viento, temperatura en el punto de rocío, cobertura de nubes, calmas y precipitación. La NN consistió en seis nodos de entrada, 10 nodos intermedios y un nodo de salida (estructura 6 x 10 x 1), representando la concentración de ozono estimada.

Ambos modelos (RNL y NN) se aplicaron para las estaciones de ozono (Mayo 15 a Septiembre 15) de 1998 y 1999. Se estableció como valor de alta concentración de ozono, aquellas concentraciones que sobrepasarán 110ppb; encontrando prácticamente el mismo desempeño en pronóstico ambos modelos, con un porcentaje de detección de excedencia a la norma del 42% para ambos

casos. Para las dos estaciones combinadas, la media absoluta del error del valor pronosticado fue de 12.5 ppb para NRL y 12.3 ppb para el modelo NN.

Comrie (1997) haciendo una comparación entre modelos de Redes Neuronales (NN) y modelos de Regresión para la predicción de ozono, desarrollando el estudio en 8 ciudades (Atlanta, GA; Boston, MA; Charlotte, NC; Chicago, IL; Phoenix, AZ; Pittsburg, PA; Seattle, WA y Tucson, AZ), encontró, que los modelos NN (comparando estadísticamente) son mejores (pero no dramáticamente) que los modelos de regresión en la predicción de ozono; y que estos tipos de modelos son muy sensibles a los diferentes regímenes meteorológicos en las estimaciones cada uno hace.

Dentro de los modelos de regresión, *Comrie (1997)* menciona que la alternativa más comúnmente aplicada son las aproximaciones estadísticas multivariantes, ya sea con relaciones lineales, no lineales o una combinación entre ambas. Los modelos de regresión pueden incorporar típicamente una o dos variables de entrada, pero se han llegado a utilizar hasta 313 variables diferentes para el desarrollo de la estructura matemática, por lo que en muchas ocasiones se parte de una regresión lineal múltiple de tipo entero o stepwise, siendo éste un método de selección de variables conforme al grado de importancia y/o correlación que guardan las diferentes variables independientes respecto a la dependiente, tal que si el valor de F es pequeño (≤ 0.05) esa variable independiente tendrá una mejor correlación con la dependiente, y si F es grande (≥ 1.0) la variable independiente será rechazada; para con esto centrarse en las variables que podrían proporcionar una mejor correlación y estimado del ozono pronóstico.

Debido a que las concentraciones de ozono máximas son parcialmente dependientes de las concentraciones de días previos, algunos investigadores consideran el emplear éste como una variable predictor adicional al modelo.

Respecto a las redes neuronales, principalmente se manejan estructuras de tres capas (alimentación, transferencia ó activación y salida), variando el número de vectores de entrada y nodos de interconexión. En este estudio se encontró que el número de nodos en la capa de transferencia no es directamente análogo a el

número de coeficientes en una regresión, siendo esto una elección "incorrecta" para estimar el número de nodos. Para redes neuronales que no procesen una base de datos grande una estructura de red de 4 x 6 x 1 proporciona un buen desempeño; mientras que para bases de datos grandes se emplean estructuras de 5 x 7 x 1. En su estudio se empleó una estructura de red de 4 x 6 x 1 para procesar 690 datos, donde 440 (elegidos al azar) fueron empleados en el entrenamiento y los 250 restantes (cuasi- independientes) para la validación, aplicando este proceso a 8 ciudades dando un total de datos analizados de 5520. Las redes neuronales pueden llegar a correrse por 10,000 iteraciones sobre los datos de entrenamiento.

Soja y Soja (1999) desarrollaron un estudio para estimar índices de ozono basados en parámetros meteorológicos simples (Temperatura y duración de la luz del sol), aplicando modelos de regresión y de redes neuronales. El estudio se basó en una recopilación de datos de 1993-1995, monitoreados en una zona rural de Seibersdorf al este de Austria. Los datos corresponden a los meses de Mayo a Septiembre de cada año; obteniendo valores máximos diarios, promedio de 7 horas (9-16 h) y ozono acumulado superior a las 40ppb durante las horas de luz.

Se encontró que el modelo de regresión mostró un mejor desempeño en comparación con el de red neuronal, debido básicamente a que este último tenía una estructura muy simple al presentar dos nodos de entrada y dos de transferencia en las capas (2-2-1).

El modelo de regresión mostró una correlación $R^2=0.64$ para la temperatura, y de 0.57 para la duración de la luz del sol, al emplear el promedio de ozono de 7 horas. Con esto muestran que un modelo de muy baja demanda de parámetros de entrada puede ser suficiente para predecir índices de ozono con una precisión similar a modelos mas complejos; considerando su aplicación en regiones topográficamente homogéneas y en ambientes rurales donde las emisiones y el transporte de los precursores de ozono, además de ser bajos son relativamente constantes.

multivariable) es mejor. Algunos mencionan que no existe diferencia significativa entre ambos (ej. Cobourn, 2000), otros que los modelos de regresión son mejores (ej. Comrie, 1997), inclusive otros indican que las redes tienen un mejor desempeño (ej. Soja, 1999). Sin embargo, aún cuando existen diferencias entre ambos, éstas por lo general no son muy grandes (estadísticamente hablando).

Por lo qué, en este estudio no solo se busca el desarrollar un modelo de pronóstico de concentración de ozono (siendo el objetivo principal), sino también, el poder hacer una comparación entre ambos modelos, con la finalidad de ver si en nuestro caso particular existen o no diferencias significativas.

Los modelos desarrollados en este trabajo de tesis se caracterizan por considerár dentro de su estructura tanto variables meteorológicas como químicas, hecho que no consideraron en sus estudios diferentes investigadores citados con anterioridad. Los modelos desarrollados en este estudio tendrán la capacidad de estimar la concentración de ozono (ppb, considerando que 1ppb equivale a 1×10^{-3} ppm) máxima para el día de interés, considerando condiciones meteorológicas que se presentarán para ese día y concentraciones de especies químicas presentadas un día previo; reportando el nivel de concentración de ozono en tres diferentes rangos de calidad ambiental: **Buena, Modera y Mala**.

La evaluación del desempeño real de los modelos, se realizó considerando valores observados de las diferentes variables meteorológicas y químicas, proporcionadas por el SIMA y CNA, para el área metropolitana de Monterrey en los meses de Enero a Noviembre del 2002; sin llegar a una evaluación del desempeño de los modelos pronósticos alimentados con variables meteorológicas estimadas para el día de interés.

Chang y Rudy (1993) muestran la relación entre los precursores de ozono y su concentración, empleando un modelo de relaciones semi-empíricas.

En este trabajo, se menciona que la relación funcional entre los niveles de máxima concentración de ozono se da a partir de los gases orgánicos no metánicos (NMOG) y la concentración de NO_x, siendo estos significativos en zonas urbanas. Se establece una relación R como una función efectiva entre NOMG/NO_x, donde R puede ser aproximada como una función simple dentro de una función exponencial; considerando además a la temperatura como una variable meteorológica fundamental en la estimación de las concentraciones de ozono.

El experimento consistió en tres casos: a) Con los precursores iniciales únicamente, b) con las concentraciones iniciales y emisiones, c) con las concentraciones iniciales, emisiones y dilución. Encontrando la siguiente ecuación:

$$O_3 = c + \gamma(NO_x)^{1/2} [1 - \exp(-aR^b)] \exp\left[-d\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{av}}\right)\right] \quad (13)$$

donde c, γ , a, b, d; son parámetros determinados por regresiones no lineales, T es la temperatura para cada corrida del experimento y T_{av} es la temperatura promedio del día (21.1°C) y R= NOMG/NO_x.

Bajo estos experimentos se logro obtener una correlación R²=0.90, sin olvidar que esta estimación fue bajo condiciones "controladas" experimentalmente.

Los resultados de los estudios de Cobourn, Comrie, Chang, Hubbard y Soja, serán el punto de comparación con los resultados obtenidos en el presente trabajo, ya que estos además de hacer uso de técnicas de regresión multivariable y redes neuronales artificiales, engloban de cierto modo, algunos de los resultados y/o metodologías empleadas por otros autores.

Es importante mencionar que entre los investigadores en esta área, surgen diferencias en cuanto a que modelo (entre redes neuronales y regresión

CAPÍTULO 3.

DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA.

En este capítulo se explican los pasos que se siguieron para la realización de esta tesis, partiendo de la fuente de datos, desarrollo y calibración de los modelos pronóstico, hasta la evaluación del desempeño de los mismos.

3.1. Fuente de Datos.

Los datos empleados fueron otorgados por el Sistema Integral de Monitoreo Ambiental (SIMA) y la Comisión Nacional del Agua (CNA).

Por parte del SIMA se contó con datos de 1998-2001, para cada mes de dichos años. Estos datos son diarios con lecturas cada hora de 0 a 23 hrs. por mes.

Los datos son:

- Dirección de viento en Azimut
- Velocidad del viento (Km/hr)
- Concentraciones (ppb) de: SO₂, O₃, NO, NO₂, NO_x y CO (ppm),
Temperatura ambiente (°C)
- PM₁₀ (µg/m³)

Estos datos fueron medidos en cada una de las 5 estaciones de monitoreo automáticas (figura 3.1.) manejadas por el SIMA^{**}. Las estaciones son las siguientes:

Estación Sureste (La Pastora).

Ubicada en el parque La Pastora en Guadalupe, N.L. Esta estación está localizada a favor del viento de un limitado corredor industrial en un área altamente poblada. La escala espacial es vecindad/urbana, como el resto de las

^{**} Sistema Integral de Monitoreo Ambiental, <http://www.nl.gob.mx/dep/sduop/sima/sima.htm>

estaciones de monitoreo, lo que da una representatividad de un área de aproximadamente 10 kilómetros alrededor. Esta estación no está influenciada por grandes fuentes industriales y sirve para detectar el incremento en los niveles de calidad del aire de entrada al área Metropolitana de Monterrey de este a oeste.

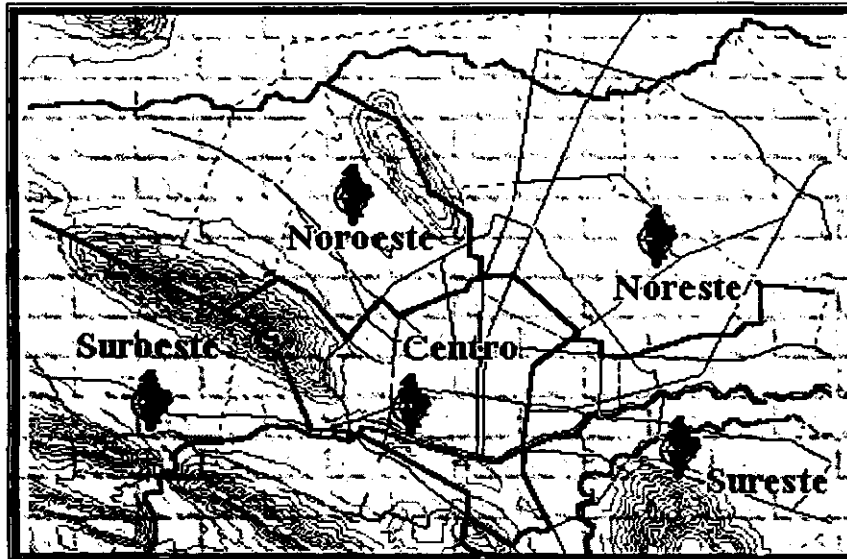


Figura 3.1. Ubicación de las estaciones de monitoreo ambiental, en el Área Metropolitana de Monterrey. (SIMA)

Estación Noreste (San Nicolás).

Ubicada en la colonia Unidad Laboral en San Nicolás de los Garza, N.L. Esta estación está localizada a favor del viento de un corredor industrial en un área altamente poblada. Esta estación aunque está localizada cerca de una área industrial, no está influenciada directamente por una industria en particular, aunque en ciertos episodios meteorológicos se ve la influencia de la Planta Termoeléctrica de la CFE.

Estación Centro (Obispado).

Ubicada en los patios de Agua y Drenaje de Monterrey en el área del Obispado. Esta estación fue ubicada para monitorear la contaminación de fuentes vehiculares e industriales en el centro del área Metropolitana de Monterrey, para

medir impactos del tráfico y la mezcla de los contaminantes de la mayoría de las fuentes industriales.

Estación Noroeste (Metro).

Ubicada en los talleres de Metrorrey, en la Col. San Bernabé, Monterrey, N.L. Esta estación está localizada a favor del viento de salida hacia el Oeste de la mayoría de las fuentes industriales y del tráfico del área Metropolitana de Monterrey, en una área de alta concentración de población.

Estación Suroeste (Santa Catarina).

Ubicada en el centro de Santa Catarina, N.L. Esta estación está localizada a favor del viento de la mayoría de las fuentes industriales en Monterrey, San Pedro Garza García y Santa Catarina. Como la estación Noroeste, esta estación es donde regularmente se presentan las más altas concentraciones de algunos contaminantes, como las Partículas Menores a 10 Micras y contaminantes secundarios en el caso del Ozono. Se ha comprobado que las mediciones de esta estación, son representativas de las encontradas dentro del valle donde se encuentra localizada la estación.

Por parte del CNA se proporcionaron datos diarios para cada mes, dentro del periodo 1998 al 2001, monitoreados en la estación Observatorio, San Nicolás de los Garza.

Los datos son:

- Temperatura (°C): Bulbo seco, Máxima, Mínima, Oscilación, Mínima de intemperie, Bulbo Húmedo.
- Tensión de Vapor (°C): Promedio, Máxima, Mínima
- Punto de Rocío.
- Humedad relativa (%): Promedio, Máxima, Mínima
- Presión de la estación (mbar): Promedio, Máxima, Mínima, Osc.
- Presión Reducida del Nivel del Mar (mbar): Promedio, Máxima, Mínima y Oscilación.

- Nubosidad (OKT) promedio del día
- Visibilidad Diurna
- Visibilidad Nocturna
- Insolación (Horas de sol)
- Precipitación (mm) total del día
- Evaporación (mm)

3.2. Base de Datos para el Análisis.

A los datos del SIMA se les calcularon valores máximos, mínimos y promedios, con la finalidad de encontrar estadísticos diarios para cada mes. Antes de hacer esta operación, se siguió un proceso de control de calidad marcando los datos inválidos con **ND**, siendo algunos ya marcados por el propio SIMA y otros agregados por tener lecturas con magnitudes de concentración negativas.

A partir de una revisión al Tercer Informe de Calidad de Aire en ciudades Mexicanas 1998 (INE 1999), correspondiente al área Metropolitana de Monterrey; se propuso el manejo de los datos para la estación Suroeste. Esta estación reporta la mayor cantidad en niveles altos de contaminación atmosférica, respecto a las 4 estaciones restantes, debido principalmente por factores meteorológicos (vientos que circulan de este a oeste) que acarrearán los contaminantes a ese punto.

De acuerdo a lo reportado en dicho informe, la figura 3.2 muestra el porcentaje de días en que se alcanzaron o rebasaron los 100 puntos IMECA de ozono en cada una de las cinco zonas de la ciudad durante el período de 1993 a 1998. Se observa que en 1998 hubo una disminución en el número de excedencias en todas las zonas a excepción de la noroeste, siendo la zona suroeste la que registró la mayor frecuencia durante este año. Cabe señalar que el porcentaje de días fuera de norma en 1998 se presentó con una frecuencia por debajo del 8% en todas las zonas y que el sector suroeste sigue siendo la zona con más problemas de contaminación.

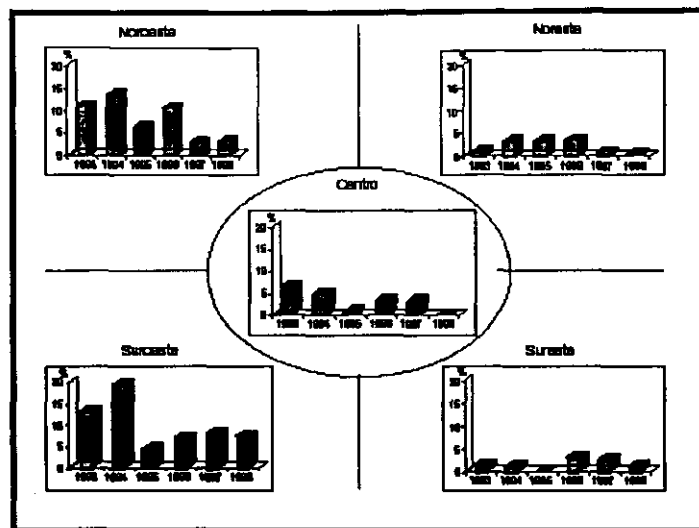


Figura 3.2. Porcentaje de días que se alcanzó o rebasó los 100 puntos IMECA de ozono por zona y por año en el AMM. (INE, 1999)

El informe menciona que para 1998 no se rebasaron los 150 puntos IMECA de ozono y la frecuencia de excedencias a la norma de calidad del aire fue del 4% (14 de los días), 6% menos que durante 1997. La figura 3.3 muestra el comportamiento de los valores IMECA máximos mensuales de ozono 1993 a 1998, observándose que para este último año, los valores máximos fueron mayores a la norma de calidad del aire durante seis meses, cuatro menos que el año anterior, alcanzándose valores superiores a los 120 puntos IMECA en los meses de marzo y mayo (como referencia 100 IMECA son 110 ppb, 150 IMECA son 170 ppb y 200 IMECA 230 ppb).

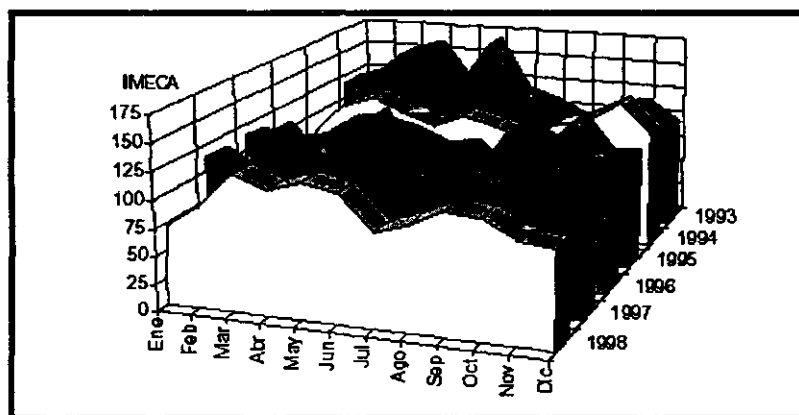


Figura 3.3. IMECA máximo mensual de ozono en el AMM durante 1993-1998 (INE, 1999)

Base de datos conformada

Se creó la estructura de la base de datos que ingresará a los programas de regresiones y redes neuronales, con la finalidad de seleccionar posteriormente las variables que proporcionan mejor correlación con la concentración máxima de ozono del día, además de considerar sus posibles implicaciones físicas y químicas que guardan con el ozono.

Las variables que conformaron la base de datos fueron todas las otorgadas por el SIMA para la estación Sureste, con datos máximos, mínimos y promedio para cada día; dentro de las variables que proporciona CNA ingresan: Porcentaje de humedad relativa (máximo, mínimo y promedio), presión de la estación (máximo, mínimo y promedio), nubosidad expresado en OKT (solo proporciona CNA un valor por día) y precipitación (solo proporciona CNA un valor por día).

Se ingresaron las variables meteorológicas (humedad relativa, presión, nubosidad y precipitación) y químicas (principalmente ozono y óxidos de nitrógeno), ya que todas ellas contribuyen (positiva o negativamente) a la formación de ozono.

3.3. Aplicación de las Regresiones.

Aplicaciones Preliminares.

Teniendo la base de datos con las diferentes variables (químicas y meteorológicas) con lecturas diarias para cada año del periodo 1998-2001, se busco encontrar correlación entre éstas y la concentración de ozono del día siguiente. Tal que, se aplicaron diferentes regresiones en el software SPSS, tomando la concentración máxima de ozono del día siguiente como la variable independiente y cada una de las diferentes variables del día anterior como variables independientes, haciendo regresiones sobre sus valores máximos, mínimos y promedios (excepto nubosidad y precipitación) observados para cada día.

Los valores de concentración en los diferentes contaminantes medidos por el SIMA que tuvieron concentraciones por debajo de 1 ppb, fueron excluidos y

marcados con **ND** debido a que esta concentración esta muy cercana a los límites de detección de los equipos.

Con la finalidad de englobar el horario de sol, dado que es en este periodo cuando se tienen condiciones necesarias para las reacciones fotolíticas y con esto máxima generación de ozono, se ingresaron a la base de datos algunas de las variables ya consideradas pero en bloques horarios. Los bloques conformados (4) corresponden a los siguientes horarios: 6-9hr, 9-12hr, 12-15hr, 15- 18hr; quedando en estos bloques los valores máximos y promedios de las variables O₃, NO, NO₂, NO_x, temperatura y velocidad del viento, siendo estas medidas por el SIMA, recordando que esta red tiene mediciones cada hora de 0 a 23 hrs. para cada día. Además, en estas aplicaciones se generaron 12 bases de datos correspondientes a cada mes del año; por ejemplo, la base de enero contaba con lecturas para ese mes en el periodo 1998-2001, y así el resto de las bases en sus respectivos meses. Sin embargo, en esta etapa preliminar no se lograron resultados satisfactorios, dada la poca correlación que mostraron las variables respecto al ozono del día siguiente, en sus diferentes regresiones.

Cabe señalar que en un principio se había considerado segregar cada año en bloques o meses específicos agrupados debido básicamente a un análisis en serie de tiempo del comportamiento de las concentraciones de ozono a lo largo del año, tomando como criterio ubicar la curva de valores máximos de concentración de ozono en el año, siendo para el AMM en el periodo 1998-2001 de marzo a octubre. Sin embargo, al comparar los valores de correlación (R^2) obtenidos en el análisis de las diferentes variables contra ozono, se observó que las mejores correlaciones se obtenían sin realizar este acotamiento de meses en los años; es decir que se tendrá mejor correlación en las variables, al hacer la regresión sobre el año completo. Por lo que se decidió optar por esta última consideración.

Aplicaciones Finales.

Se aplicó una reestructuración a la base de datos, acomodando meses consecutivos para cada año (1998-2001) generando con esto 4 bases; optando por tomar como nueva variable dependiente al ozono máximo del día y como

variables independientes a las correspondientes a ese mismo día para el caso de las meteorológicas, y de un día previo para las variables químicas.

Nuevamente se realizaron diferentes regresiones, encontrando buenas correlaciones. Al hacer las regresiones se observó que al aplicarla sobre los valores máximos de las diferentes variables respecto al ozono máximo del día, se obtenían valores de R^2 superiores a los encontrados sobre los valores mínimos y promedios.

Para las variables NO_2 y NO_x se ingresaron los valores de concentración (ppb) máximos presentados en el horario de 15 a 23 hrs. del día anterior, ya que es en este horario donde los procesos fotolíticos se reducen por un decremento paulatino de la luz solar y las velocidades de reacción en la formación de ozono, tendiendo a una acumulación de los óxidos de nitrógeno por la tarde, tal que, fungirán como materia prima en la generación de ozono del día siguiente, recordando que los óxidos de nitrógeno son los principales precursores en la generación de ozono.

Considerando lo anterior, la base de datos que fue empleada para el desarrollo de los modelos de pronóstico de ozono es:

- Lecturas de valores máximos del día en las variables: temperatura, porcentaje de humedad relativa, presión y velocidad del viento.
- Las variables precipitación y nubosidad solo contaban con una lectura por día, tal que fue este valor el que ingresó a la base de datos.
- Concentración de ozono máxima del día y concentración máxima de ozono del día anterior, por considerar que podrá existir una cantidad remanente en el medio de ozono principalmente los días donde se reportaron altas concentraciones.
- Concentraciones máximas de NO_2 y NO_x de 15 a 23 hrs. del día anterior.

3.4. Desarrollo de los Modelos Pronóstico.

Los modelos pronóstico creados, tendrán como facultad estimar la concentración de ozono (ppb) máxima de el día de interés, siendo alimentados con variables meteorológicas pronosticadas para ese día y concentraciones de especies químicas del día anterior.

Modelo de Regresión No Lineal (RNL).

Teniendo las diferentes regresiones y considerando las de mejor correlación, se tomarán los coeficientes de regresión correspondientes; con la meta de encontrar la mejor función de predicción de ozono, con sistemas de regresión no lineal.

Modelo de Red Neuronal Artificial (RNA).

Considerando las variables meteorológicas y químicas seleccionadas, se implementará un arreglo de red neuronal, para con esto generar un modelo que pueda reflejar un buen desempeño en la estimación de los niveles de ozono. La red será del tipo de retropropagación en multicapas, estableciendo el mejor arreglo de la misma, considerando número de capas internas y nodos de transferencia; aplicando en cada unidad de la red funciones de transferencia no lineales.

3.5. Calibración de los Modelos.

Una vez obtenidos los modelos, se les aplicó un análisis estadístico para con esto, identificar que tan próximos están los datos estimados respecto a los valores observados, haciendo un comparativo de frecuencias, media y desviación estándar. Así, se especificó la correlación que guarda el modelo, así como el valor de los diferentes parámetros; señalando en cada uno: el error estándar y el intervalo de confianza al 95%. Además, se evaluó el grado de acondicionamiento de la matriz de correlación de los diferentes parámetros, arrojada en el análisis del modelo desarrollado.

Así mismo, se determinó el porcentaje de acierto del modelo, respecto a los valores de ozono pronosticado contra los valores reales en dos grupos o bloques de intervalos (cada uno con tres rangos). El primer bloque con rangos de concentración de ozono (ppb) de: <80, 80-120, >120; y el segundo bloque con rangos de: <60, 60-110, >110. La separación en tres rangos de concentraciones de ozono (ppb), señalará diferentes calidades de aire partiendo de **Buena, Moderada y Mala**; esta última se alcanzará cuando el nivel máximo permisible por normatividad sea rebasado.

De acuerdo a la Agencia de Protección al Ambiente de los Estados Unidos (EPA), el valor máximo permisible de concentración de ozono es de 120 ppb en una hora, una vez al año. La Norma Oficial Mexicana "NOM-020-SSA1-1993", establece que la concentración de ozono, como contaminante atmosférico, no debe rebasar el límite máximo normado de 110 ppb (100 IMECAS), o lo que es equivalente a $216 \mu\text{g}/\text{m}^3$, en una hora, una vez al año, en un periodo de tres años, para protección a la salud de la población susceptible.

3.6. Evaluación del Desempeño de los Modelos.

Los modelos obtenidos fueron evaluados en función de su desempeño, considerando el porcentaje de acierto que presentó cada modelo respecto al valor de ozono observado, haciendo un análisis estadístico de la comparación. Para esto se aplicó cada modelo en modo pronóstico a una base de datos correspondiente a meses del 2002 otorgados por SIMA y CNA. Este punto tiene como finalidad, el evaluar que tan bien o mal actúa el modelo, comparando los resultados pronosticados con los observados en esos meses.

CAPÍTULO 4.

ANÁLISIS DE LAS VARIABLES PREDICTOR.

En este análisis se presentan las variables (meteorológicas y químicas) que ingresaron al modelo RNL y RNA, basada su selección en base a la correlación que muestran con la concentración de ozono, para con esto poder concretar un modelos que permitan estimar en forma pronóstico la concentración de O₃ del día de interés, dadas diferentes condiciones ambientales y de concentración de compuestos químicos que actuarán como precursores principales del mismo, así como de sus posibles implicaciones físicas y químicas que afectan la concentración de dicho contaminante.

Se emplearon diferentes regresiones apoyados en el software SPSS v.10. Las regresiones aplicadas fueron las siguientes: Lineal, cuadrática, cúbica, logarítmica, exponencial y de crecimiento. La estructura de dichas regresiones es la siguiente:

- LINEAL $Y = B_0 + (B_1 * x)$ (14)

- CUADRÁTICA $Y = B_0 + (B_1 * x) + (B_2 * x^2)$ (15)

- CÚBICA $Y = B_0 + (B_1 * x) + (B_2 * x^2) + (B_3 * x^3)$ (16)

- LOGARÍTMICA $Y = B_0 + (B_1 * \ln(x))$ (17)

- EXPONENCIAL $Y = B_0 * (\exp (B_1 * x))$ (18)

Donde "Y" representa la variable dependiente, en nuestro caso la concentración de O₃ (ppb) máxima del día, "B_n" los coeficientes de regresión en los diferentes tipos de regresión y "x" la variable independiente.

Las variables meteorológicas consideradas fueron: Temperatura, velocidad del viento, presión y humedad relativa, todas ellas con valores máximos del día; así como, radiación solar total (RST) promedio del día y precipitación total del día, siendo reportado en ambas un único valor para el día por parte de CNA. Las variables químicas consideradas fueron: Ozono del día anterior, NO₂ (15 a 23 hrs.

del día anterior) y NOx (15 a 23 hrs. del día anterior), todos ellos con lecturas de concentración (ppb) máxima.

Las regresiones de las variables respecto a la concentración de ozono del día se realizaron para cada uno de los años de 1998 a 2001, mostrando únicamente las figuras de regresión que mostraron una correlación mayor entre estos 4 años.

4.1. Análisis de las Variables meteorológicas.

TEMPERATURA.

Esta variable ha demostrado tener una fuerte correlación con la concentración de ozono (Robenson y Steyn, 1990). Los razonamientos básicos a este efectos son: (a) las velocidades de reacción fotoquímica son sensibles a la temperatura, y (b) altas temperaturas en el aire son asociadas a condiciones con sistemas de baja movilidad (días con poca nubosidad, soleados y circulación estancada).

La velocidad de reacción (en reacciones fotolíticas) se puede determinar de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$j_A = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \sigma_A(\lambda, T) \phi_A(\lambda, T) I(\lambda) d\lambda \quad (19)$$

donde j_A representa la velocidad de reacción fotolítica, λ la longitud de onda (nm), $\sigma_A(\lambda, T)$ es la absorción en la sección de cruce ($\text{cm}^2 \text{molécula}^{-1}$), $\phi_A(\lambda, T)$ es la producción de quantum por fotólisis e $I(\lambda)$ es el flux (fotones $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{nm}^{-1}$). Es en σ_A y ϕ_A donde se tiene el efecto de la temperatura. Otras reacciones atmosféricas se pueden representar con una forma de Arrhenius, donde la constante cinética es función de la temperatura.

En este trabajo se encontraron valores de R^2 máximos para el 2000 de 0.528 aplicando una regresión exponencial (figura 4.1), confirmando la relación tan estrecha que guarda la concentración de ozono con la temperatura, tal que, al presentarse un incremento en la temperatura la concentración de ozono tenderá a incrementar.

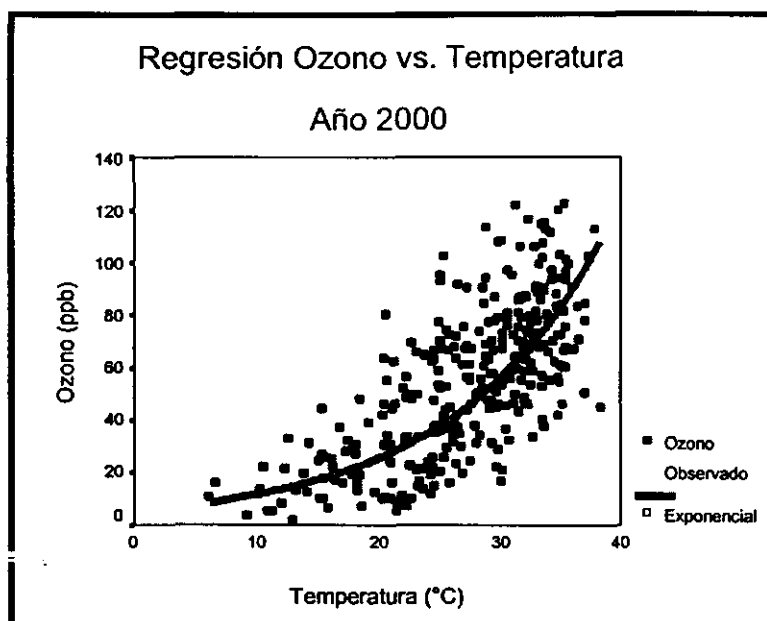


Figura 4.1. Regresión de concentración de ozono (ppb) contra temperatura máxima (°C), para el año 2000.

VELOCIDAD DEL VIENTO.

Si se considerase un análisis de dispersión de contaminantes (ej. Modelo de caja), se observaría que la concentración del contaminante tiene una relación inversa a la velocidad del viento. Sin embargo, la formación del ozono y su transporte es un fenómeno complejo, tal que la relación entre la velocidad del viento y la concentración de ozono dependerá de diversas variables tanto meteorológicas, topográficas, entre otras. En diferentes estudios (Hubbard *et al.*, 1998; Liu y Jonson, 2002), se ha detectado que al incrementar la velocidad del viento las concentraciones de ozono disminuirían, guardando en algunos casos relaciones de decaimiento exponencial, contemplando parámetros no lineales.

Dentro de este trabajo, se realizaron una serie de regresiones con la finalidad de encontrar la mejor correlación entre la concentración de ozono (ppb) y la velocidad del viento (Km/hr), resultando con mejor ajuste las de tipo cuadrático con un valor máximo de correlación R^2 de 0.104 para el año 2000 (figura 4.2.), sin mostrar una tendencia clara en la nube de puntos.

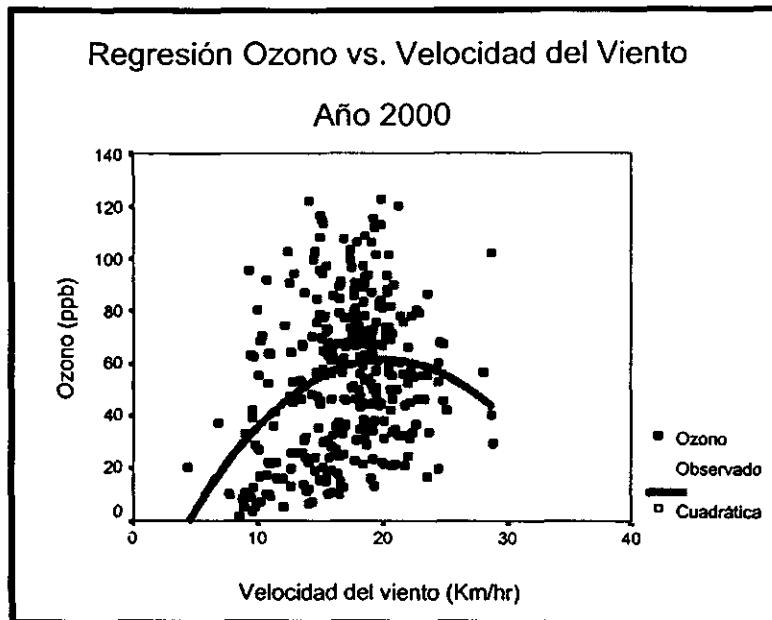


Figura 4.2. Regresión de concentración de ozono (ppb) contra velocidad del viento (Km/hr), para el año 2000.

Hay que considerar que para el AMM, específicamente en Santa Catarina N.L., se encuentran el cerro de las Mitras y la Huasteca, tal que, al circular los vientos (este a oeste) hacia esta dirección acarreado los contaminantes de la mayoría de las fuentes industriales en Monterrey, se podría presentar un efecto de acumulación de contaminantes apoyado por dichas serranías, ya que, al no permitir una libre flujo de la masa de aire, se podrán generar vórtices con un incremento en las concentraciones de contaminantes. A medida que transcurra la tarde las velocidades de viento incrementarán propiciado mayor movilidad, aunado a un decremento en la radiación solar que reducirá las reacciones fotolíticas de formación de ozono; siendo este hecho muy específico para el AMM.

Las correlaciones obtenidas entre la velocidad de viento y la concentración de ozono fueron bajas, sin embargo no se descarta esta variable meteorológica por tratarse de un factor importante en la dispersión de contaminantes atmosféricos, que mostrará su relevancia al conjuntarla con el resto de las variables a considerar. En este estudio se consideró únicamente la magnitud de la velocidad medida en la estación suroeste del SIMA, por lo que se recomienda en

posteriores estudios el tomar en cuenta la dirección dado que el viento es un vector, considerando los vectores de viento de Este a Oeste por ser estas las direcciones de viento reinante en el AMM.

RADIACIÓN SOLAR TOTAL.

En la atmósfera la disociación fotoquímica se puede considerar como un proceso de dos etapas. 1) La absorción de un fotón de energía por una especie química, conduciendo a este a un estado excitado y 2) la disociación de el producto excitado de nuevos productos que pueden ser altamente reactivos. Generando con esto el neblumo fotoquímico (Wark y Warner, 2000).

Si bien la radiación solar total (RST) no fue un parámetro reportado en las bases de datos originales, se partió de la nubosidad para llegar a este valor. La valoración de los niveles de radiación solar se derivan de formulaciones astronómicas suponiendo un cielo libre de nubes (McRae et al. 1981). Sin embargo en la mayoría de las aplicaciones prácticas, las nubes están presentes, logrando con esto una reducción en los niveles de radiación solar. Bajo estas circunstancias se hace un estimado de un factor de RST, empleando valores de cobertura de nubes, bajo la siguiente expresión:

$$\text{Factor de corrección RST} = 1.0 - 0.75 * (\text{nubes}/10.0)^{3.4} \quad (20)$$

El valor del factor de RST =1.0 significará un cielo totalmente despejado (sin nubes) y a medida de que aumente la nubosidad, el factor RST estará en decremento hasta llegar a una valor mínimo de 0.25. El valor de nubosidad estará expresado en oktas (OKT).

A medida que aumente la RST, la temperatura incrementará de forma proporcional, influyendo en las velocidades de reacción fotolítica incrementando la concentración de ozono. En este estudio se encontró un valor de $R^2 = 0.497$ para el año 2001 empleando una regresión exponencial (figura 4.3).

Cabe señalar que la lectura de nubosidad es subjetiva, tal que, un observador a su criterio ubica un valor de cobertura de nubes (OKT), por lo que

resultará prudente en caso de contar con lecturas de radiaciones medidas con aparatos el hacer uso de estas, evitando con esto errores por apreciación.

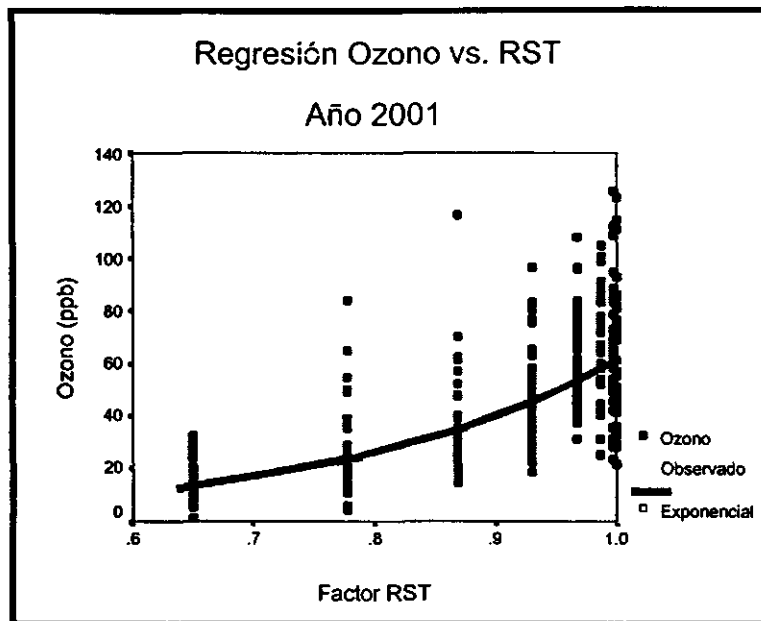


Figura 4.3. Regresión de concentración de ozono (ppb) contra factor de corrección RST, para el año 2001.

HUMEDAD RELATIVA.

La temperatura varía no solo a diferentes latitudes y altitudes, sino que guarda una relación estrecha con la cantidad de vapor de agua contenido en la atmósfera, actuando éste como un medio sinérgico que la incrementa al pasar la radiación por las gotas y con esto descomponerse como lo haría al atravesar un prisma.

En este estudio, se optó por buscar la correlación entre la temperatura y la humedad relativa, dado que la temperatura y la concentración de ozono guardan una relación directa muy estrecha. Se observó que las mejores correlaciones se obtienen bajo regresiones de tipo cuadráticas, con correlaciones R^2 de 0.194 (figura 4.4.). Asimismo, se correlacionó la concentración de ozono con la HR, encontrando que a humedades superiores al 80% el O_3 comienza a disminuir. La figura 4.5. muestra esta relación, aplicando una regresión cuadrática con correlación R^2 de 0.193.

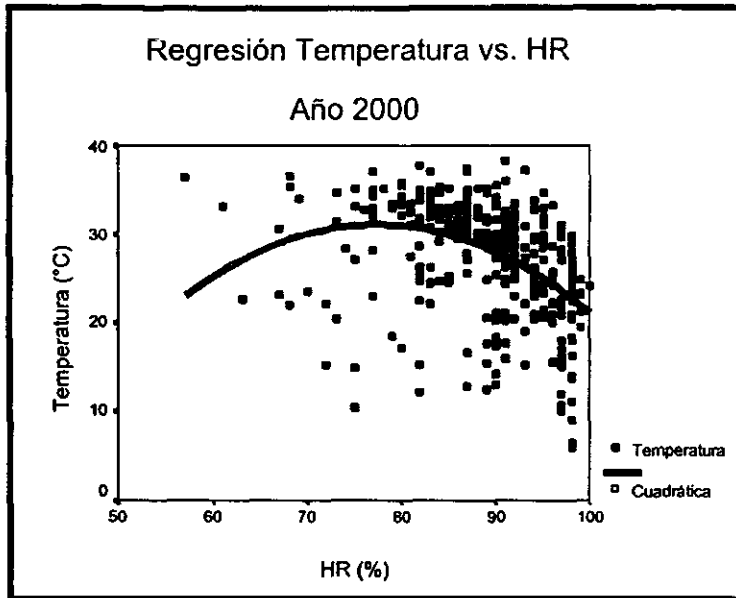


Figura 4.4. Regresión de temperatura (°C) contra humedad relativa (%), para el año 2000.

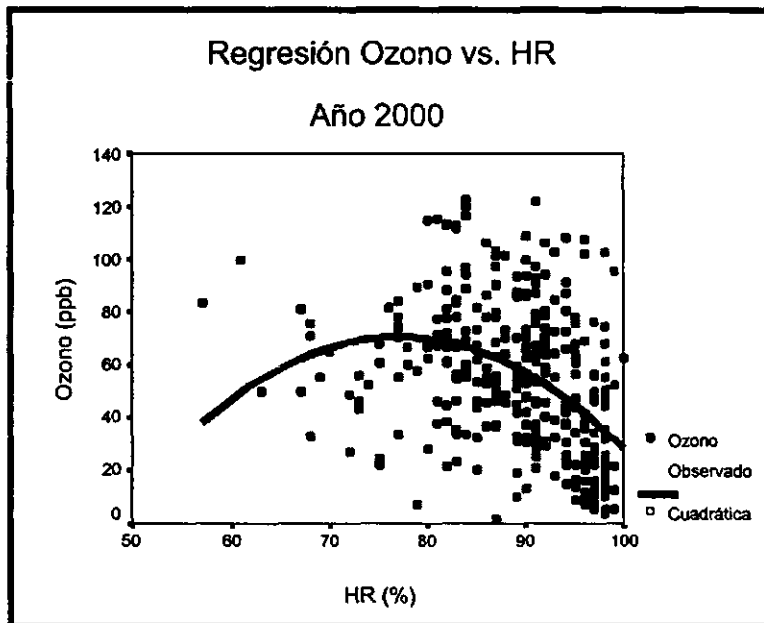


Figura 4.5. Regresión de concentración de ozono (ppb) contra humedad relativa (%), para el año 2000.

Si observamos ambas gráficas, notaremos como tanto temperatura vs. HR como ozono vs. HR, guardan un comportamiento similar, ya que en ambas se presenta una fase de decaimiento al existir en el ambiente humedades superiores

al 80%, mientras que humedades inferiores a este porcentaje favorecen el incremento tanto de la temperatura como de la concentración.

Al aumentar la humedad en el ambiente, existe la posibilidad de que los contaminantes sean absorbidos por las gotas de agua en la atmósfera, influyendo esto a una reducción de los contaminantes en ella.

En este estudio se empleo el porcentaje de humedad relativa, recordando que esta cantidad de agua en el ambiente esta definida para una temperatura determinada, tal que, para evitar esto se podrá emplear en estudios subsecuentes la humedad absoluta del medio.

PRESIÓN.

Si bien esta variable es poco empleada para el desarrollo de este tipo de modelos, se decidió trabajar con ella dada su inferencia en las condiciones de flujo de masas de aire en al medio ambiente, así como de su afectación a la temperatura. En general el flujo de las masas de aire pasan de un lugar de alta presión a una región de baja presión, creando con esto el movimiento y generación de las corrientes.

Al realizar la correlación entre la concentración de ozono y la presión, notamos que existe una relación inversa; tal que, al incrementar la presión la concentración de ozono comienza a descender, con un valor de $R^2= 0.262$ aplicando una regresión logarítmica (figura 4.6.).

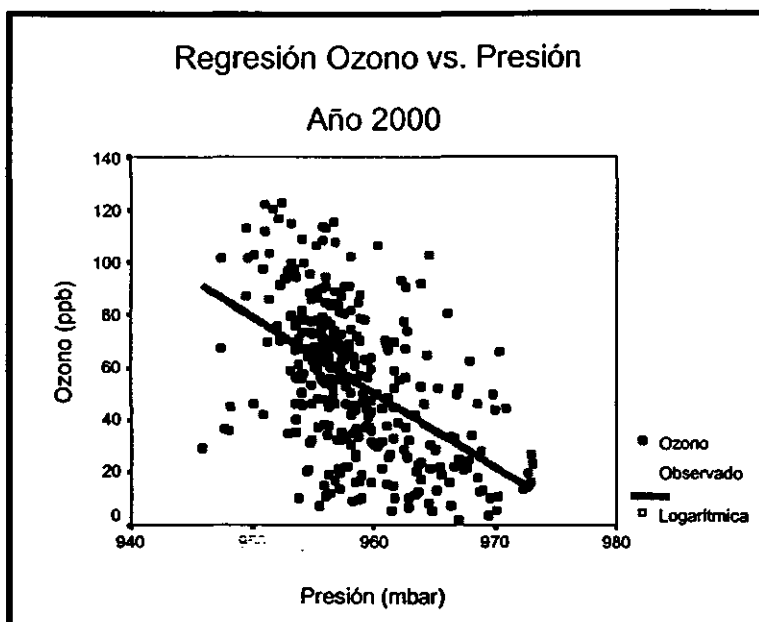


Figura 4.6. Regresión de concentración de ozono (ppb) contra presión (mbar), para el año 2000.

PRECIPITACIÓN.

La precipitación está asociada con la reducción de la concentración de ozono en la atmósfera debido básicamente al lavado que sufre éste, y en menor grado a que incrementa la cobertura de nubes y actividad convectiva. Por estos motivos, fue que se consideró el ingreso de esta variable para el desarrollo del modelo.

Sin embargo al hacer las regresiones, las correlaciones obtenidas fueron muy bajas resultando R^2 de 0.058 aplicando una ecuación lineal, que, aún cuando fue baja y no se marca una nube de puntos de concentración de ozono bien representada gráficamente con pendiente negativa, se decidió no descartar la precipitación con la finalidad de no menospreciar un proceso de lavado de contaminantes en la atmósfera (figura 4.7.).

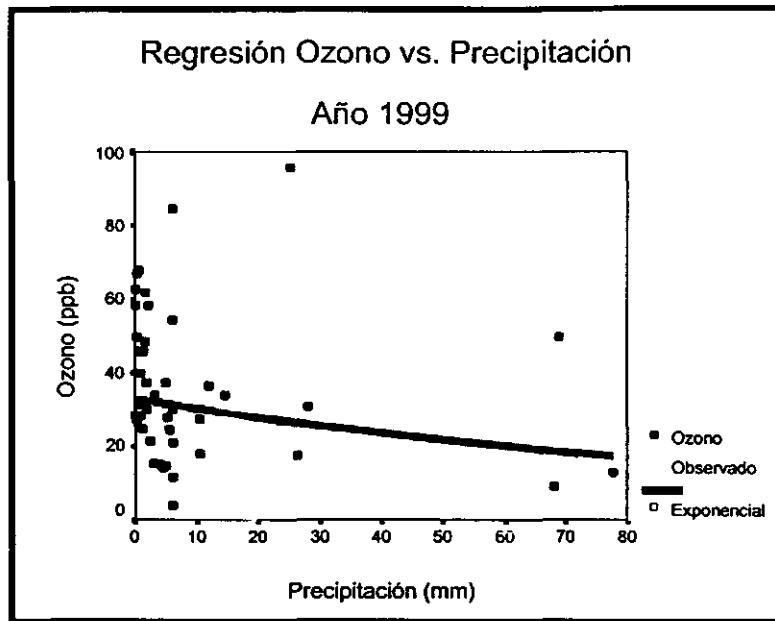


Figura 4.7. Regresión de concentración de ozono (ppb) contra precipitación (mm), para el año 1999.

4.2. Análisis de las Variables Químicas.

OZONO DEL DÍA ANTERIOR.

Los contaminantes están sujetos a diferentes mecanismos de generación o degradación como: Reacciones fotoquímicas, dispersión, absorción, deposición, entre otros; sin embargo la tasa o velocidad de que esto suceda es variable, y dependerá de efectos meteorológicos (viento, temperatura, precipitación, etc.), rugosidad (ambiente urbano, rural, costero), características de la cuenca atmosférica, así como de la concentración del contaminante en el medio.

Se ha optado por considerar como variable para el desarrollo del modelo la concentración de ozono del día anterior, dado que al generarse una alta concentración previa, muy posiblemente exista una concentración remanente en el ambiente el próximo día, siempre y cuando no existan elementos como una fuerte precipitación o alta velocidad de viento, que reduzcan dicha concentración.

Se aplico una regresión lineal entre la concentración de ozono del día y la concentración de ozono del día anterior, obteniendo una correlación máxima R^2 de 0.317, con pendiente de 0.56 e intersepto de 23.60 (figura 4.8.).

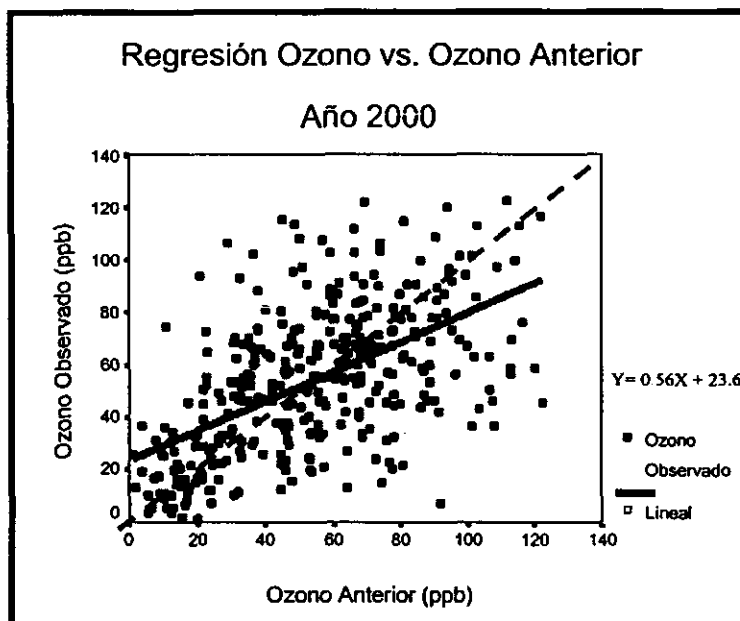


Figura 4.8. Regresión de concentración de ozono (ppb) contra ozono del día anterior (ppb), para el año 2000.

Notando que es posible que concentraciones altas de ozono previas, favorecerán altas concentraciones del contaminante el día siguiente.

ÓXIDOS DE NITRÓGENO.

Dentro de los principales contaminantes precursores en la formación del ozono, se tienen a los óxidos de nitrógeno. Los óxidos que están presentes en la atmósfera en cantidades significativas son el monóxido de nitrógeno y el bióxido de nitrógeno ($NO_x = NO + NO_2$) donde aproximadamente el 90% de estos son destruidos por fotólisis en la formación de ozono (Wark y Warner, 2000).

Si bien estos contaminantes sufrirán su mayor rompimiento fotolítico, en los horarios de máxima incidencia lumínica (11-15 hrs), pasado este período las concentraciones de óxidos de nitrógeno comienzan paulatinamente a incrementarse. De este modo la concentración de NO_x que no fue afectado en el

periodo fotolítico, fungirá como materia prima o precursor para la formación de ozono del día siguiente. Por lo que se optó por considerar las concentraciones máximas tanto del NO_2 como de NO_x , correspondientes al horario de 15-23 hrs. del día anterior al pronóstico.

Se realizaron diferentes regresiones de los óxidos de nitrógeno con el ozono, encontrando que la mejor correlación se logra con ecuaciones cuadráticas tanto para NO_2 como NO_x , la máxima correlación R^2 fue de 0.038 y de 0.014 (figura 4.9), respectivamente. Aún cuando los valores de correlación son bajos, no se descartan las variables dada su importancia en la química atmosférica para la formación de ozono.

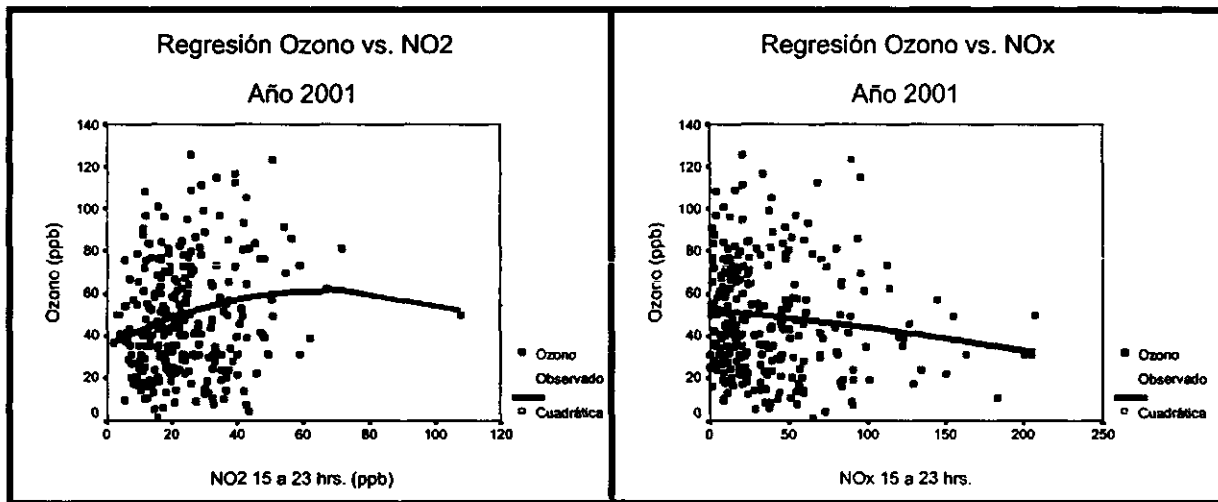


Figura 4.9. Regresión de concentración de ozono (ppb) contra concentración máxima de NO_2 15 a 23 hrs. (ppb) del día anterior *izquierda*, y contra concentración máxima de NO_x 15 a 23 hrs. (ppb) del día anterior *Derecha*, para el año 2001.

CAPÍTULO 5.

MODELOS PRONÓSTICO OBTENIDOS.

Una vez hecha la selección de las diferentes variables tanto físicas como químicas, se procedió al desarrollo de los diferentes modelos pronóstico (Modelo de regresión no lineal y Modelo de redes neuronales).

Cada uno de los modelos obtenidos fue calibrado con la base de datos de 1998 al 2001 (datos de SIMA y CNA). Se corrió el modelo alimentado de dicha base de datos, y se compararon las concentraciones estimadas de ozono (ppb) con las concentraciones observadas, aplicando un análisis estadístico entre ambas.

Para evaluar el desempeño se hicieron dos pruebas. La primera en base a una comparación del número de datos que cayeron en cada rango de calidad ambiental (especificados en el Capítulo 3, sección 3.5), así como del porcentaje de aciertos que mostró el modelo entre las concentraciones de ozono estimadas respecto a las observadas, para el periodo 1998-2001.

La segunda prueba de desempeño, se realizó sobre una base de datos correspondiente a los meses de Enero a Noviembre del 2002, con la finalidad de evaluar que tan bien o mal actúa el modelo, comparando los resultados pronosticados con los observados en esos meses, aplicando un análisis estadístico de la comparación.

5.1. Modelo de Regresión Multivariable.

5.1.1. Obtención del modelo de Regresión

Para la obtención del modelo, se dio a la tarea de conformar una serie de ecuaciones que fueran generando una mejor aproximación a el modelo pronóstico final. El criterio para ingresar una nueva variable y/o acomodo de la misma en las ecuaciones fue el siguiente:

a) Que cada cambio realizado en la ecuación base, tuviese una mejor correlación (R^2) en el grado de estimación de la concentración de ozono.

b) Que el incremento de la correlación fuera consistente, es decir que la misma ecuación aplicada a los diferentes años otorgara un mejor ajuste, independientemente del grado del mismo.

c) La ecuación base del modelo, partiría de una regresión lineal múltiple, con la finalidad de ser esta, la mínima correlación aceptada para el modelo y en cierto modo ubicarnos en el peso o grado de ingerencia de cada una de las variables independientes, respecto a la variable dependiente; en este caso la concentración de ozono a pronosticar.

Se desarrollaron diferentes ecuaciones, donde cada una de ellas nos brindo poco a poco los resultados buscados. Sin embargo fue necesario el crear una nueva adecuación a la base de datos ya existente. Si bien la base de datos original estaba conformada al colocar de manera conjunta todos los meses de cada año (1998-2001), existían en dichas bases diferentes huecos de datos por los siguientes factores:

- 1) No existir lectura de concentraciones de ozono del día.
- 2) Falta de datos meteorológicos.
- 3) Falta de datos en las variables químicas (NO_x y NO_2).

Por lo que se optó por generar dos bases de datos, denominando a la original como "Completa", y la nueva base de datos como "Ajustada" que contará con valor en todas las variables para los diferentes días del (los) año(s), eliminando los días con huecos.

Dentro de los motivos por los que se tomo esta decisión están los siguientes:

a) Al hacer la regresión no lineal en el software SPSS v.10.0, el sistema toma en cuenta días con valor en la variable dependiente (ozono observado), tal que las fila donde esta celda no tenga valor no ingresará a la regresión. Sin embargo, podrán existir celdas donde si exista un valor de la variable

dependiente pero una o varias variables independientes en ese día no tengan valor y aún así ingresa toda la fila a la regresión. En ese caso el software realizará internamente una interpolación para con esto soportar la falta de valores en la base de datos (sobre las variables independientes) y dar la correlación (R^2).

b) Al aplicar el modelo de regresión sobre la base de datos original (sin eliminar espacios con faltantes de datos) para obtener las concentraciones pronóstico, en los días donde existan valores faltantes de alguna variable, el modelo tendrá un desempeño pobre en sus estimados.

c) Aplicando el modelo tanto a la base completa como a la ajustada, se podrá evaluar el grado de sensibilidad del mismo, al no ser alimentado con todas las variables que requiere para el pronóstico, lo que nos dará un panorama de que tan robusto es el modelo en su estructura.

Las ecuaciones de pronóstico obtenidas, fueron aplicadas a cada uno de los años comprendidos en el periodo 1998-2001, tanto en la base de datos Completa como en la Ajustada. Las correlaciones en ambas bases se muestra en la tabla 5.1; dichos ajustes se lograron aplicándoles la misma ecuación de pronóstico.

Tabla 5.1. Correlación (R^2) aplicando la misma ecuación pronóstico, a ambas bases de datos (Completa y Ajustada).

AÑO	Correlación R^2	
	COMPLETA	AJUSTADA
1998	0.476	0.481
1999	0.511	0.513
2000	0.635	0.632
2001	0.629	0.630

En esta tabla se puede observar que no existe diferencia significativa entre los valores de R^2 entre la base completa y la ajustada comparando el mismo año, sin embargo al comparar el valor de R^2 entre los diferentes años se observa una clara diferencia en los niveles de correlación (en ambas bases de datos), tal que, para los años 2000 y 2001 se encuentran los valores máximos de R^2 a diferencia

de los años 1998 y 1999. Debido a esto, se optó por agrupar los 4 años del periodo, para con esto lograr una correlación más homogénea y que no este acotada a un año en específico, obteniendo como resultado un valor de R^2 para el conjunto ajustado de 0.522, siendo este superior al conjunto de años de la base de datos completos, correspondiéndoles un valor de R^2 de 0.459, como sería de esperarse; el valor de R^2 del conjunto ajustado y conjunto completo surge de aplicar el modelo de regresión no lineal a los datos de los 4 años en conjunto.

A partir de los resultados de correlación para el conjunto de años, se puede observar que el mejor ajuste lo guarda el conjunto de datos ajustados, básicamente por no existir faltantes de datos en la regresión, y con esto una reducción en los espacios de recuperación del modelo pronóstico. Refiriéndonos a los espacios de recuperación, como las zonas donde no existieron datos de alguna o algunas variables, y por tal, el modelo genera un estimado para absorber estos faltantes, logrando con esto una mejor aproximación a las concentraciones de ozono observadas, pero sin alcanzar ajustes como los logrados en los conjuntos sin faltantes de datos (Conjunto Ajustado).

En la tabla 5.1 la diferencia en los valores de R^2 no es tan evidente si comparamos para el mismo año entre ambas bases de datos, pero al tener las bases con todos los años agrupados esta diferencia se nota con facilidad, esto resulta al incrementarse la cantidad de datos faltantes en la base, tal que la regresión en la base completa trabajó con 1402 días y la ajustada con 1308 días, siendo la diferencia (94 días) la eliminación de días con faltantes de valores en algunas de las variables.

Al colocar los años agrupados se obtienen las correlaciones mencionadas con anterioridad (Ajustado $R^2= 0.522$ y Completo $R^2= 0.459$), y con esto un modelo que no es específico a un año en el periodo, sino un modelo que engloba al periodo en sí. Con la finalidad de hacer una comparación entre ambos conjuntos, se optó por aplicarles un análisis estadístico, para con esto, poder discernir en el modelo final a aplicar en este estudio. El análisis estadístico incluye estimación de medias, desviaciones estándar, máximos y mínimos, así como la

estimación de la frecuencia de las concentraciones de ozono ajustando a una curva normal.

A continuación, en las tablas 5.2 y 5.3, se presentan los resultados obtenidos para el Conjunto Ajustado y Completo:

Tabla 5.2. Análisis estadístico de concentraciones de ozono. Conjunto Ajustado correspondiente al periodo de 1998-2001.

		Ozono Observado	Ozono Pronostico
Número de datos	Validos	1308	1308
	Perdidos	0	0
Media		54.30	54.23
Desviación estándar		26.59	19.18
Mínimo		2	-21
Máximo		178	104

Tabla 5.3. Análisis estadístico de concentraciones de ozono. Conjunto Completo correspondiente al periodo de 1998-2001.

		Ozono Observado	Ozono Pronostico
Número de Datos	Validos	1402	1461
	Perdidos*	59	0
Media		53.60	48.39
Desviación estándar		26.45	32.10
Mínimo		1	-173
Máximo		178	97

* Datos perdidos: corresponde a los días donde no se reportaron (por parte del SIMA) datos de concentración de ozono, tal que, el software SPSS al notar esos huecos de la variable dependiente elimina la fila completa automáticamente.

Si comparamos los resultados mostrados en las tablas 5.2 y 5.3, notaremos que el conjunto ajustado guarda una mejor relación entre el valor de media para los datos observados contra el pronóstico, así como un desviación estándar muy próxima al observado, y en cierto punto reducida tal que para el ozono pronóstico muestra un valor de desviación de 19.18, lo que nos habla de una menor dispersión de las concentraciones respecto al valor central bajo una curva normal; mientras que para el conjunto completo, se pierde un poco esta proximidad en los

valores estadísticos, mostrando incrementos considerables en los valores de la desviación estándar.

El modelo en ambas bases de datos (Ajustada y Completa) arroja valores de concentración de ozono negativas, este hecho se debe a que el valor de ozono observado mínimo es muy bajo (1-2 ppb) y al momento de hacer el pronóstico el modelo arrojará valores también muy bajos llegando a ser en este caso negativos, recordando que el modelo se basa en regresiones (no lineales) que buscarán la nube de puntos de concentración de ozono central, dejando fuera a los extremos tanto mínimos como máximos, siendo en estos extremos donde puede arrojar valores un tanto erróneos, hecho que difícilmente sucedería sobre la parte central de la nube de puntos de concentración. Si comparamos los resultados obtenidos por el conjunto ajustado con el conjunto completo, notaremos que el valor mínimo para el primero (pronóstico) es de -21 ppb de ozono, mientras que para el completo el valor es de -173 ppb, sobrepasando al encontrado en el ajustado, básicamente debido a faltantes de datos en una o varias variables en los diferentes días, así como a la explicación anteriormente expuesta.

Sin embargo, bien podrá emplearse el modelo en caso de no contar con algún valor de las variables requeridas en su alimentación, pero con posible disminución en la certeza de su concentración de ozono estimada. Por lo que se optará por manejar el conjunto ajustado y mostrar de forma gráfica su curva de frecuencias bajo una tendencia normal (figura 5.1).

Las lecturas negativas podrán evitarse al condicionar el modelo a una frontera, tal que al momento de aproximarse a un valor negativo el modelo emita una lectura de concentración baja (ej. 1 ppb) considerando que no existen valores de concentración negativa. En este estudio no se condicionó el modelo a un valor de frontera, hecho que podrá ser empleado en estudios posteriores.

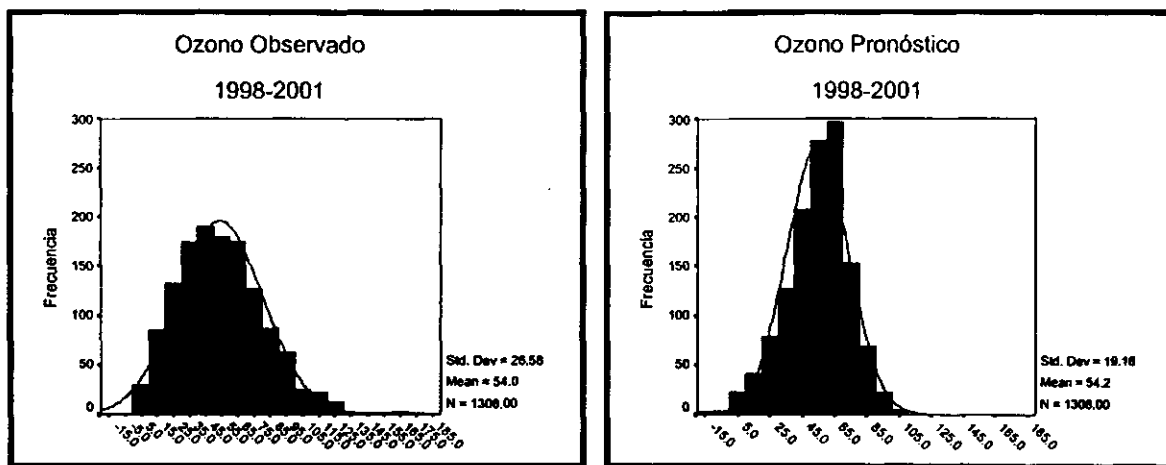


Figura 5.1. Curvas de frecuencia de concentraciones de ozono, correspondientes para el conjunto ajustado. *Izquierda* ozono observado, *Derecha* ozono pronóstico.

Se puede observar que las curvas de frecuencias mostradas en las figura 5.1, guardan una relativa similitud y tendencia en sus frecuencias. Si analizamos el la figura, notaremos que tanto los valores de ozono observado y el pronostico guardan la misma concentración media y desviaciones próximas. Las concentraciones de 40-60 fueron las que reportan mayor frecuencia para los datos observados, con niveles superiores a las 150 veces; mientras que para los datos pronosticados tenemos las concentraciones de 45 y 55-65 con frecuencias de 200 ocasiones y superior a las 250 respectivamente.

A partir de este momento, queda establecido el modelo pronóstico final que será calibrado y evaluado en su desempeño, correspondiendo a la base de datos del conjunto ajustado; siendo este descrito en el apartado "Modelo de Pronostico".

Cabe señalar que el modelo pronóstico de regresión (RNL) guarda la misma estructura tanto para los datos completos como los ajustados, cambiando únicamente los valores de los coeficientes de regresión de cada una de las variables. Es de esperar que el usuario al aplicar el modelo final ingrese todos los valores de las diferentes variables que lo alimentan para con esto obtener un buen estimado de la concentración de ozono esperada, en caso de que no se alimente en su totalidad el modelo, éste podrá soportarlo pero con una posible reducción en

su eficiencia o certeza del valor pronosticado. El modelo generado tendrá entonces, la capacidad de amortiguar faltantes de datos, lo que nos habla de lo robusto de su estructura.

5.1.2 Modelo Pronóstico (RNL).

El modelo pronóstico obtenido, en base a regresión no lineal, consiste en un intercepto, 14 coeficientes de regresión, y 9 variables independientes, quedando establecido de la siguiente manera:

$$\hat{O}_3 = (F * Ozant) + \{B_0 + [T_0 \exp(T_1 * Temp)] + B_3 * HR + B_4 * Precip + B_5 * Pres + B_6 * RST + [(N_1 * NO_2) + (N_2 * NO_2^2)] + [(NX_1 * NOx) + (NX_2 * NOx^2)] + [(W_1 * VV) + (W_2 * VV^2)]\}$$

Las variables independientes son: Concentración de ozono del día anterior en ppb (*Ozant*), temperatura máxima (°C) del día de interés (*Temp*), porcentaje de humedad relativa máximo del día de interés (*HR*), precipitación (mm) máxima del día de interés (*Precip*), presión (mbar) máxima del día de interés (*Pres*), factor de radiación solar total del día de interés (*RST*), concentración máxima de dióxido de nitrógeno en ppb (*NO₂*) del día anterior 15-23 hrs., concentración máxima de óxidos de nitrógeno en ppb (*NOx*) del día anterior 15-23 hrs., y velocidad del viento (Km/hr) máxima del día de interés (*VV*).

Los coeficientes de regresión son: *F*, *B₀*, *T₀*, *T₁*, *B₃*, *B₄*, *B₅*, *B₆*, *N₁*, *N₂*, *NX₁*, *NX₂*, *W₁* y *W₂*, correspondiendo en este orden a las variables anteriormente mencionadas. El valor de cada uno de los coeficientes así como su error estándar e intervalo de confianza asintótico al 95% se muestra en la tabla 5.4. Así mismo, en la tabla 5.5 se muestra la matriz de correlación de los coeficientes de regresión, la cuál tiene un valor de condicionamiento de 1.3177×10^5 .

Es importante señalar que el coeficiente *F*, es un “factor remanente” de la concentración de ozono (ppb) que se presentó un día anterior al que se desee obtener el pronóstico. Dicho factor surge de una regresión no lineal aplicando a las 9 diferentes variables independientes. El valor promedio de este factor fue de 0.21,

lo que podría sugerir que aproximadamente un 20% del ozono que se generó un día antes al día de interés, será la concentración remanente en el medio. Tal que, a medida que la concentración de ozono del día anterior sea mayor, el valor obtenido de $F \cdot O_3 \text{ ant}$ también será alto.

TABLA 5.4. Coeficientes de regresión del modelo pronóstico (RNL), obtenidos para una regresión de años acumulados (1998-2001), con $R^2 = 0.52247$

Coeficiente	Valor	Error estándar	Intervalo de Confianza asintótico al 95%	
			Inferior	Superior
F	0.2152	0.0241	0.1678	0.2626
B ₀	64.6724	149.1794	-228.0118	357.3567
T ₀	41.5513	41.5289	-33.9269	129.0295
T ₁	0.0216	0.0117	-0.0014	0.0447
B ₃	0.0759	0.0572	-0.0364	0.1883
B ₄	-0.1085	0.0916	-0.2884	0.0713
B ₅	-0.1739	0.1380	-0.4447	0.0968
B ₆	63.3802	6.6711	50.2916	76.6711
N ₁	0.6991	0.1298	0.4443	0.9540
N ₂	-0.0048	0.0014	-0.0077	-0.0020
NX ₁	-0.0782	0.0518	-0.1798	0.0234
NX ₂	0.00008	0.0002	-0.0003	0.0004
W ₁	-0.7378	0.7528	-2.2148	0.7391
W ₂	-0.0120	0.0191	-0.0495	0.0253

Tabla 5.5 Matriz de correlación de los coeficientes de regresión del modelo pronóstico (RNL).

	F	B ₀	T ₀	T ₁	B ₃	B ₄	B ₅	B ₆	N ₁	N ₂	NX ₁	NX ₂	W ₁	W ₂
F	1.0000	-.0043	-.0476	.0193	.0488	.0214	.0232	-.0233	-.1425	.0791	.0628	-.0227	-.0725	.0638
B ₀	-.0043	1.0000	-.4822	.4346	-.0077	.0828	-.9528	.1272	.0099	.0067	-.1394	.1180	.0218	-.0224
T ₀	-.0476	-.4822	1.0000	-.9957	-.0684	-.0703	.2030	-.1911	.0062	-.0546	.0912	-.0638	-.0470	.0517
T ₁	.0193	.4346	-.9957	1.0000	.0569	.0651	-.1501	.1593	-.0048	.0497	-.0699	.0468	.0367	-.0445
B ₃	.0488	-.0077	-.0684	.0569	1.0000	-.0783	-.0226	.3343	.0046	.0017	.0016	.0068	.0540	-.0247
B ₄	.0214	.0828	-.0703	.0651	-.0783	1.0000	-.0760	.3000	-.0019	.0089	-.0077	-.0056	-.0591	.0504
B ₅	.0232	-.9528	.2030	-.1501	-.0226	-.0760	1.0000	-.1190	-.0133	.0100	.1116	-.1015	-.0563	.0517
B ₆	-.0233	.1272	-.1911	.1593	.3343	.3000	-.1190	1.0000	-.0258	.0301	-.1029	.0294	-.1253	.1120
N ₁	-.1425	.0099	.0062	-.0048	.0046	-.0019	-.0133	-.0258	1.0000	-.8723	-.6584	.6200	-.1358	.1425
N ₂	.0791	.0067	-.0546	.0497	.0017	.0089	.0100	.0301	-.8723	1.0000	.4316	-.5515	.1560	-.1507
NX ₁	.0628	-.1394	.0912	-.0699	.0016	-.0077	.1116	-.1029	-.6584	.4316	1.0000	-.8923	.2345	-.2071
NX ₂	-.0227	.1180	-.0638	.0468	.0068	-.0056	-.1015	.0294	.6200	-.5515	-.8923	1.0000	-.1320	.1149
W ₁	-.0725	.0218	-.0470	.0367	.0540	-.0591	-.0563	-.1253	-.1358	.1560	.2345	-.1320	1.0000	-.9769
W ₂	.0638	-.0224	.0517	-.0445	-.0247	.0504	.0517	.1120	.1425	-.1507	-.2071	.1149	-.9769	1.0000

En la tabla 5.6 se muestran los incrementos en valor de R^2 al acoplar cada variable (meteorológica y química) en el modelo RNL final en el periodo 1998-

2001. Además, se muestran los valores obtenidos de pruebas F en cada ingreso de variables, con la finalidad de verificar si cada adición en el arreglo proporciona una mejoría en las estimaciones de concentración de ozono (ppb), considerando un intervalo de confianza del 95% estadísticamente hablando.

TABLA 5.6. Incrementos de correlación (R^2) al ingresar cada variable a la estructura del modelo RNL.

Variables	R^2	F calculada	F tablas (95%)
Temperatura	0.33800	2940.44	$F_{0.5, 3, 1305}$ 2.60
Temperatura y RST	0.40664	2495.93	$F_{0.5, 4, 1304}$ 2.37
Temperatura, RST y Ozono anterior	0.44963	2168.76	$F_{0.5, 5, 1302}$ 2.21
Temperatura, RST, Ozono anterior y Velocidad del viento	0.49692	1709.59	$F_{0.5, 7, 1300}$ 2.01
Temperatura, RST, Ozono anterior, Velocidad del viento y ($NO_2 + NO_x$)	0.52062	1148.88	$F_{0.5, 11, 1296}$ 1.79
Temperatura, RST, Ozono anterior, Velocidad del viento, $NO_2 + NO_x$ y (HR + Presión + Precipitación)	0.52247	941.65	$F_{0.5, 14, 1189}$ 1.70
Lineal múltiple	0.45031	825.00	$F_{0.5, 10, 1298}$ 1.83

En esta tabla se puede observar como cada ingreso de variables mostró un incremento en la correlación del modelo hasta llegar a su estructura final, aunado a que en los diferentes ingresos de variables la F de tablas fue menor a la calculada, por lo que, al 95% de nivel de confianza cada ingreso de variables generará en una mejor estimación de las concentraciones de ozono para el día de interés. Cabe señalar que se supera el valor mínimo de $R^2 = 0.45$ obtenido al hacer una regresión lineal de todas las variables, siendo este valor de correlación el mínimo aceptable para el modelo RNL.

Para poder apreciar de manera gráfica los valores estimados comparados con los reales, se presenta la figura 5.2 donde se muestra la nube de puntos de concentraciones estimadas respecto al las observadas aplicando una regresión lineal simple. Así mismo, en la figura 5.3 se muestra una serie de tiempo con los valores observados de ozono en el periodo 1998 al 2001 y sobrepuestos en dicha serie los valores estimados en concentración de ozono (ppb).

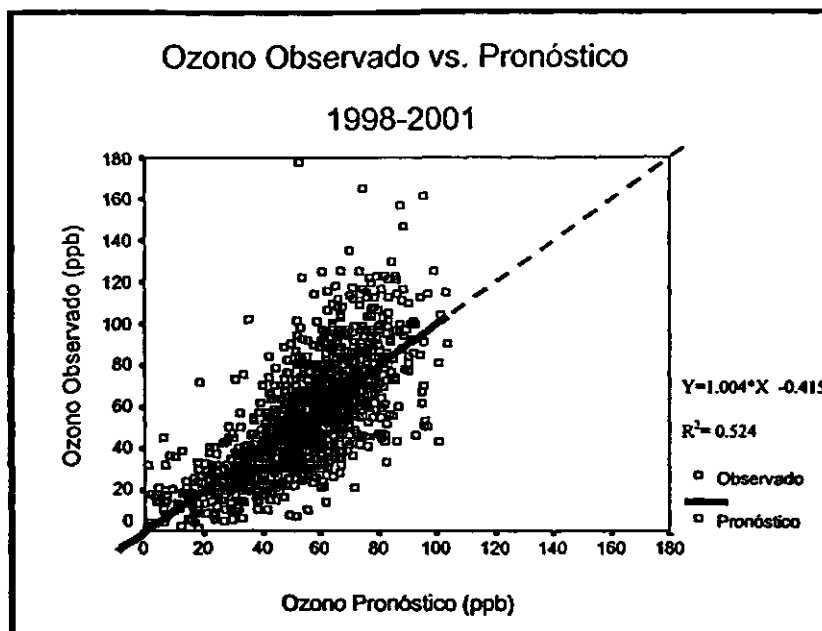


Figura 5.2 Relación entre valores de concentración de ozono observado (ppb) respecto a concentraciones de ozono pronosticado (ppb), aplicando una regresión lineal.

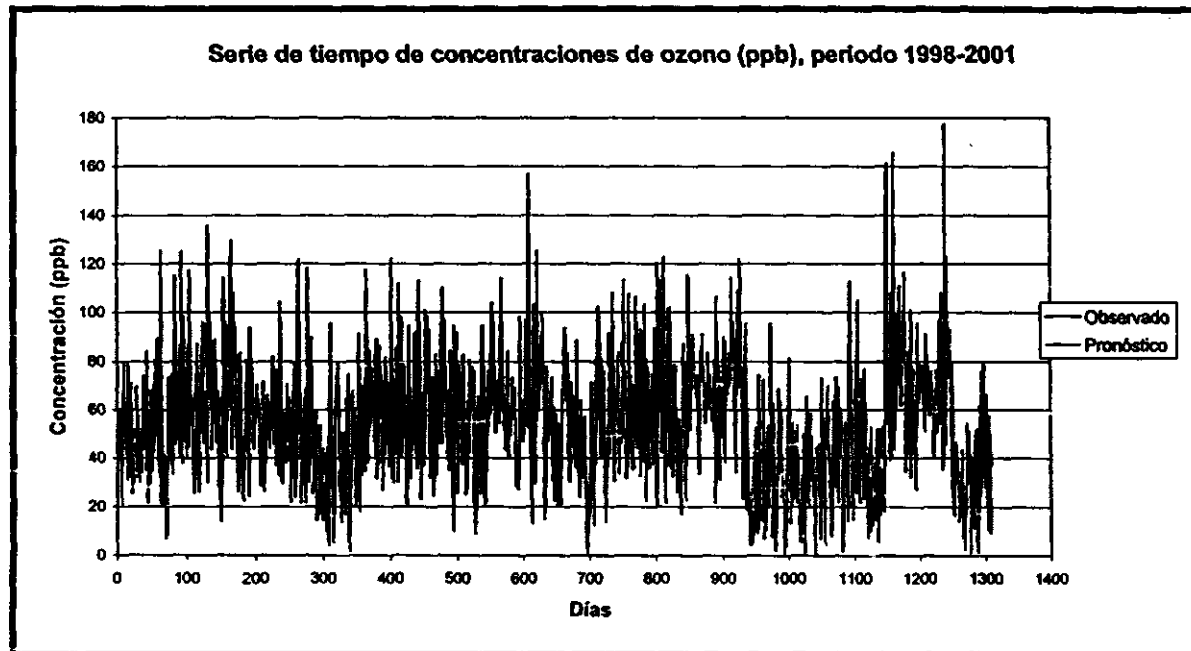


Figura 5.3 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb), para el periodo 1998-2001.

En la figura 5.2 se puede apreciar cómo las estimaciones de concentración de ozono se aproximan “razonablemente” bien ($m= 1.004$, $b= -0.415$ y $R^2= 0.524$) a las concentraciones observadas, notando como la mayoría de la nube de puntos de ozono observado se encuentra en la línea de ozono pronóstico. En la figura 5.3, se observa en la serie de tiempo la relación estrecha entre ambos valores de concentración, guardando los valores pronosticados el mismo comportamiento en el periodo 1998-2001 respecto a las concentraciones de ozono observadas.

Sin embargo también es apreciable, que el modelo en algunos valores de concentración de ozono observado muy elevados no alcanza esos niveles de estimación en la concentración, por lo que se tratará este hecho en la sección de calibración del modelo, así como el ingreso de un nuevo factor (diferente al factor remanente “F”) que actuará como un incremento al valor de concentración estimado por el pronóstico.

5.1.3 Pre-evaluación del Modelo (Back-casting).

Con la finalidad de pre-evaluar el modelo pronóstico, se procedió a aplicarlo sobre la base de datos de 1998-2001, de modo individual para cada año, así como los años en conjunto. Dado que resultaría muy difícil pretender tener estimados muy puntuales y próximos a las concentraciones de ozono observadas (debido a la complejidad de los procesos atmosféricos), se optó por establecer rangos de concentraciones de ozono (ppb), dichos rangos son los siguientes:

1. < 80 ppb, 80-120 ppb, >120ppb
2. <60 ppb, 60-110ppb, >110ppb

El primer bloque de rangos surge a partir de la normatividad de la EPA, y el segundo de acuerdo a la Norma Oficial Mexicana (NOM-020-SSA1-1993) en materia de ozono. Estableciendo ambas calidades de aire partiendo de **Buena** en el nivel mas bajo de concentración de ozono, **Moderada** y **Mala**, siendo esta última cuando se sobrepasa el límite permisible de concentración de ozono por las normas.

Sobre estos intervalos de concentración, se revisó la cantidad de valores observados que caían en ellos, para posteriormente hacer una contabilización de los valores que estimó el modelo y que efectivamente corresponden a las ocasiones que se encontró este intervalo en la realidad, siendo este número la cantidad de veces que el modelo hizo una estimación atinada.

Debido a que el modelo por sí mismo difícilmente alcanzaba a detectar rangos de concentración muy elevados (superiores a la norma), se usó un nuevo factor, siendo éste diferente al factor remanente "F".

El nuevo factor actúa como un incremento "I" a la concentración pronosticada por el modelo, dicho incremento no ingresa a la regresión, sino que se calibró en base a alcanzar el número de ocasiones que sobrepasaba la norma las concentraciones observadas; es decir, si en un año determinado se observaban 4 ocasiones en que la concentración de ozono rebasó la norma, el valor del incremento sería el necesario para que al multiplicar éste por la concentración estimada se llegará a las 4 ocasiones, sin saber (hasta ese momento) si las ocasiones que la concentración estimada marcará una excedencia correspondieran a los días en que realmente se presentaron.

Este incremento estaba en función de la correlación obtenida para el año en cuestión, así como de que tantas ocasiones en ese periodo se sobrepasó la norma; obteniendo incrementos que van de 1.20 a 1.30, estos incrementos corresponden al Incremento "F1" para rangos propuestos en base a la EPA, y el Incremento "F2" para los propuestos apartir de la NOM-020.

El incremento actúa de la siguiente manera, si por ejemplo el modelo estima una concentración de ozono de 50 ppb, al aplicar un factor de 1.25 la concentración se incrementará a 62.5 ppb es decir en un 25% sobre la estimación del modelo.

Si bien de este modo se podría sobreestimar la concentración de contaminante que se podrá presentar, esto será preferible (hablando de seguridad a la población) que subestimarla, además de que se podrán alcanzar los valores pico que difícilmente se estimarían con el modelo obtenido.

El modelo entonces tendrá la siguiente forma:

$$\hat{O}_3 = I * \hat{O}_3i$$

donde I representa el incremento (Incremento "F1", Incremento "F2"), \hat{O}_3i es la concentración de ozono (ppb) estimada por el modelo y \hat{O}_3 es la concentración pronóstico final.

En la tabla 5.7 se muestra el porcentaje de veces que se acertó en el rango de concentraciones para cada año y el incremento aplicado a la concentración estimada por el modelo.

TABLA 5.7 Porcentaje de certeza en los diferentes rangos de concentración de ozono (ppb) obtenidos por el modelo pronóstico (RNL) respecto a los valores observados, para cada uno de los años de 1998 al 2001.

		Ozono en ppb					Ozono en ppb		
		<80	80-120	>120			<60	60-110	>110
AÑO	Observado	317	41	7	Observado	233	111	12	
1998	Pronóstico	94.30%	17.07%	0.00%	Pronóstico	85.65%	63.06%	0.00%	
	Incremento F1=1.29	80.54%	78.05%	14.28%	Incremento F2=1.27	49.33%	86.49%	16.67%	
AÑO	Observado	294	63	3	Observado	198	155	7	
1999	Pronóstico	98.64%	23.81%	0.00%	Pronóstico	74.24%	80.00%	0.00%	
	Incremento F1=1.30	61.22%	84.13%	33.33%	Incremento F2=1.25	42.42%	94.84%	14.29%	
AÑO	Observado	258	60	2	Observado	177	133	10	
2000	Pronóstico	94.19%	41.67%	0.00%	Pronóstico	84.18%	80.45%	0.00%	
	Incremento F1=1.20	77.91%	78.33%	50.00%	Incremento F2=1.22	64.41%	90.98%	10.00%	
AÑO	Observado	245	34	6	Observado	194	81	10	
2001	Pronóstico	96.73%	44.12%	0.00%	Pronóstico	88.66%	77.78%	20.00%	
	Incremento F1=1.19	88.57%	61.76%	33.33%	Incremento F2=1.16	77.84%	82.72%	40.00%	

En la tabla anterior, se puede apreciar que el modelo sin aplicarle el incremento difícilmente logra estimar concentraciones de ozono elevadas (solo las detectó para el año 2001); tal que al aplicar dicho incremento, sí se logran detectar rangos de concentración de ozono elevados con el modelo pronóstico, obteniendo buenos niveles de porcentaje de certeza.

Como se mencionó en capítulos anteriores, dada la diferencia en valor de R^2 que se obtuvo para cada uno de los años, se optó por agruparlos, para con esto tener un modelo del periodo global, que de cierto modo pueda ajustarse de forma más precisa al operarlo en modo pronóstico, sea el año que fuese. Por tal motivo se pre-evaluó el modelo sobre la base de datos de años acumulados (todo el periodo de 1998-2001), obteniendo los resultados mostrados en la tabla 5.8.

Tabla 5.8 Porcentaje de certeza en los diferentes rangos de concentración de ozono (ppb) obtenidos por el modelo pronóstico (RNL) respecto a los valores observados, para los años en conjunto del periodo 1998-2001.

		Ozono en ppb			Ozono en ppb			
		<80	80-120	>120	<60	60-110	>110	
Conjunto 1998 al 2001	Observado	1092	198	18	Observado	790	479	39
	Pronóstico	1056	53	0	Pronóstico	635	356	0
		96.70%	26.77%	0.00%		80.38%	74.32%	0.00%
	Incremento F1=1.29	792	160	5	Incremento F2=1.26	407	437	9
		72.53%	80.81%	27.77%		51.52%	91.23%	23.10%

Se puede apreciar en esta tabla que el factor de incremento de concentración estimada por el modelo juega un papel importante en el pronóstico de concentraciones elevadas del contaminante, encontrando para este grupo porcentajes de certeza en los rangos >120 de casi el 28% y para >110 del 23%, presumiendo con esto que se podrá tener un buen desempeño del modelo al trabajarlo de modo pronóstico.

Los valores reportados en el renglón "Observado" representan el número total de lecturas de concentración máxima de ozono observadas ubicadas en c/u de los rangos de calidad ambiental, siendo un total de 1308 lecturas. Tal que, en los renglones "Pronóstico" e "Incremento" aparece el número de veces que el modelo acertó en ese rango. Por ejemplo, si el pronóstico acertó en 1056 datos y el total de datos observados para ese mismo rango de calidad ambiental fue de 1092 lecturas el modelo acertó en sus estimados un 96.7%, de modo tal que el modelo no acertó en 36 lecturas observadas (3.3%), teniendo estas una concentración fuera de ese rango de calidad de aire estimada por el modelo; por lo

que el modelo si estimará 1308 valores de concentración de ozono pero no todos los estimados serán certeros respecto a los valores observados.

Bajo estos resultados en pre-evaluación tenemos eficiencias (sobre el año en conjunto 1998-2001) de:

1. Bloque de la EPA.- Eficiencia Global del Modelo Pronóstico de 84.78%
Eficiencia Global aplicando Incremento de 73.16%
2. Bloque de la NOM.- Eficiencia Global del Modelo Pronóstico de 75.76%
Eficiencia Global aplicando Incremento de 65.21%

5.1.3 Evaluación del Desempeño en Modo Pronóstico (For-casting).

Una vez hecha la pre-evaluación del modelo, éste fue aplicado sobre una base de datos correspondiente al 2002 con la finalidad de evaluar su desempeño.

La estructura del modelo fue la presentada con anterioridad (9 variables independientes y 14 coeficientes de regresión) con sus respectivos valores en cada uno de los coeficientes que lo integran, se evaluó el desempeño del modelo sin factor y considerando un factor de incremento de 1.30 para ambos rangos de calidad de aire (EPA y NOM), este incremento se aplicó debido a que el factor máximo empleado en el conjunto de años fue de 1.294 (F1), tal que se aplicará éste (redondeado a 1.30) esperando un buen desempeño del modelo. Si bien el factor de 1.30 es "superior" al de 1.26 (F2), se esperará que al ser menor el límite máximo (110 ppb) se sobreestimen picos de concentración y posiblemente se encuentren buenos resultados.

Además de la base de datos del 2002 se creó una nueva base de datos para evaluar el desempeño. La nueva base de datos es una selección de días de manera aleatoria empleando una distribución discreta, considerando que todos y cada uno de los días del año guarda la misma probabilidad de ser seleccionado aleatoriamente, generando una base de 50 días. Es importante mencionar que el valor de ozono del día anterior para cada día seleccionado al azar, corresponderá al valor real que se presentó un día antes del día en cuestión, y no será el valor

del día anterior en el orden aleatorio; es decir, si en la base de datos ingresara el día correspondiente al 5 de Febrero seguido del 20 de Noviembre, el valor de ozono del día anterior al 20 de Noviembre será el presentado el día 19 de Noviembre, y no el valor del 5 de Febrero.

La base de datos aleatoria tiene como finalidad evaluar el desempeño del modelo sobre datos que no guarden una cierta tendencia o efecto en cada una de las estaciones del año en forma ordenada, sino ingresar días aleatorios tal que se pierda esta relación; para con esto probar que tan robusto es el modelo a este tipo de desarreglos en las fechas. Es de esperarse que al ser empleado el modelo de forma real y/o rutinaria además de ingresar todas las variables que lo integran, éstas tengan relación con los cambios estacionales a lo largo del año.

Los resultados del desempeño se muestran en la tabla 5.9, expresados en porcentaje de certeza para cada uno de los rangos de calidad de aire (para EPA y NOM), aplicando el modelo pronóstico sin factor de incremento, y con un incremento de 1.30, sobre la base de datos de Enero a Noviembre del 2002. Así mismo, se presenta de manera gráfica el comportamiento de las concentraciones de ozono a lo largo del año, comparando valores observados con los estimados sin aplicar el factor (figura 5.4) y aplicando el factor de incremento (figura 5.5).

Tabla 5.9 Porcentaje de certeza en los diferentes rangos de calidad de aire, aplicando el modelo pronóstico (RNL) con y sin incremento sobre la base de datos correspondiente al 2002.

Calidad de aire EPA				Calidad de aire NOM-020			
Buena	Moderada	Mala		Buena	Moderada	Mala	
<80	80-120	>120	Ozono (ppb)	<60	60-110	>110	Ozono (ppb)
271	57	4	Observado	190	135	7	Observado
266	12	0	Pronóstico	158	95	0	Pronóstico
98.15%	21.05%	0.00%		83.16%	70.37%	0.00%	
199	45	2	Incremento	100	126	5	Incremento
73.43%	78.95%	50.00%		52.63%	93.33%	71.43%	

Bajo estos resultados de desempeño del modelo tenemos eficiencias (sobre el año 2002) de:

1. Bloque de la EPA.- Eficiencia Global del Modelo Pronóstico de 83.73%
Eficiencia Global aplicando Incremento de 74.09%
2. Bloque de la NOM.- Eficiencia Global del Modelo Pronóstico de 76.20%
Eficiencia Global aplicando Incremento de 69.57%

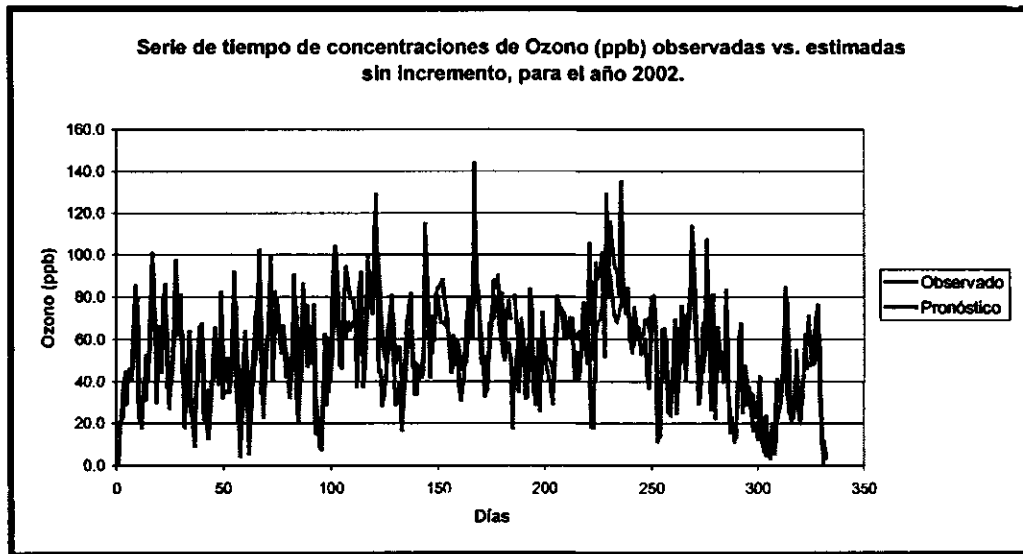


Figura 5.4 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) sin incremento, para el año 2002.

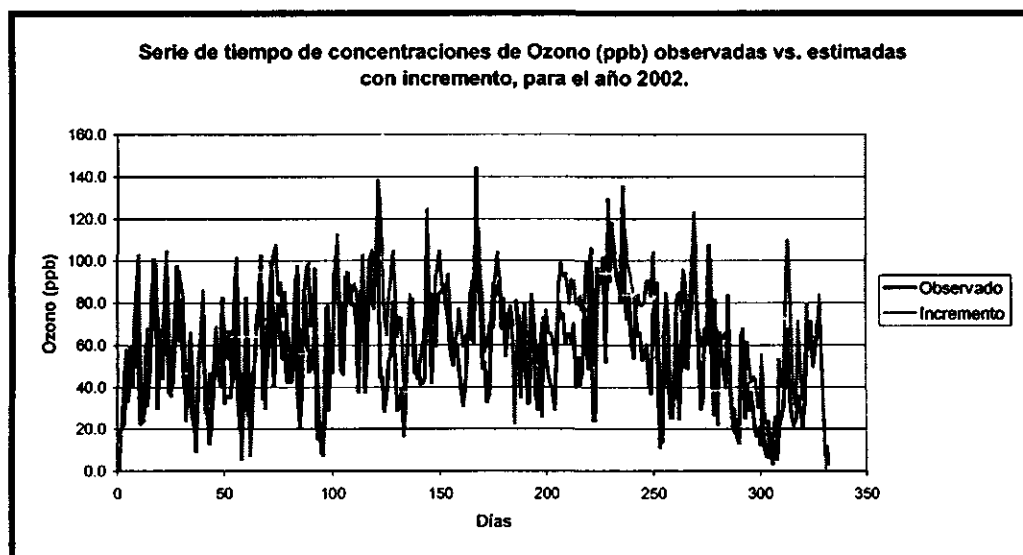


Figura 5.5 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) con incremento, para el año 2002.

En la tabla 5.10 se muestran los resultados de desempeño obtenidos al aplicar el modelo pronóstico con y sin incremento a la base aleatoria (50 datos al azar), presentado en cada uno de los rangos de calidad de aire su porcentaje de certeza alcanzado, aplicando los mismos valores de los coeficientes de regresión del modelo y un factor de incremento de 1.30.

Tabla 5.10 Porcentaje de certeza en los diferentes rangos de calidad de aire, aplicando el modelo pronóstico (RNL) con y sin incremento sobre la base de datos aleatoria correspondiente al año 2002.

Calidad de aire EPA				Calidad de aire NOM-020			
Buena	Moderada	Mala		Buena	Moderada	Mala	
<80	80-120	>120	Ozono (ppb)	<60	60-110	>110	Ozono (ppb)
45	5	0	Observado	30	20	0	Observado
44	1	0	Pronóstico	27	15	0	Pronóstico
97.78%	20.00%			90.00%	75.00%		
32	5	0	Incremento	15	20	0	Incremento
71.11%	100.00%			50.00%	100.00%		

Bajo estos resultados de desempeño del modelo "base aleatoria" tenemos eficiencias (sobre el año 2002) de:

1. Bloque de la EPA.- Eficiencia Global del Modelo Pronóstico de 90.00%
Eficiencia Global aplicando Incremento de 74.00%
2. Bloque de la NOM.- Eficiencia Global del Modelo Pronóstico de 84.00%
Eficiencia Global aplicando Incremento de 70.00%

5.2. Modelo de Redes Neuronales.

5.2.1 Obtención del Modelo de Redes (RNA).

Para el desarrollo de este modelo, se empleó el software MATLAB v.6.0 Release 12 y en particular el módulo de herramientas de Redes Neuronales (Neural Network Toolbox); usando como fuente de datos de entrada, la base ajustada correspondiente a los años 1998-2001 en conjunto (base de datos ajustada),

descrita y usada en el desarrollo del modelo de Regresión no lineal, ingresando las 9 variables seleccionadas previamente (temperatura máxima del día, velocidad del viento máxima del día, humedad relativa máxima del día, precipitación del día, presión máxima del día, radiación solar total del día, NO₂ 15-23 hrs. del día anterior, NO_x 15-23 hrs. del día anterior, y ozono del día anterior).

El modelo de red empleado correspondió al tipo de Retropropagación (Backpropagation), este tipo de modelos fue desarrollado partiendo de la regla de aprendizaje de Widrow-Hoff para redes con multicapas y funciones de transferencia no-lineales y diferenciables, tal que a cada vector de entrada le corresponderá un vector objetivo (target) que será empleado para entrenar la red para que pueda ser aproximada lo más posible por la función, para con esto obtener matrices de pesos y sesgos por cada capa (Demuth H. y Véale M, 2000).

La retropropagación estandar se basa en un algoritmo de gradiente descendente, siendo éste prácticamente la regla de Wildrow-Hoff, en la cual los pesos en la red se mueven a lo largo del negativo del gradiente de la función de desempeño. El término de retropropagación se refiere a la manera en la cual el gradiente es calculado por medio de una red en multicapas no lineal; siendo este tipo de redes neuronales capaces de resolver complejas funciones de mapeo y reconocimiento de patrones complejos, además de ser aplicadas en el campo de contaminación atmosférica (Demuth H. y Véale M, 2000).

El fundamento entonces del algoritmo de retropropagación, es hacer que la función decrezca rápidamente, es decir dirigirse al negativo del gradiente. Lo que hace es un entrenamiento y ajuste de los pesos y el (los) vector (es) de sesgo (bias vector), conforme al siguiente algoritmo:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k \quad (22)$$

donde \mathbf{x}_k es el vector de pesos y/o sesgos, \mathbf{g}_k es el gradiente y α_k es la razón de aprendizaje.

Dado que el trabajar con redes neuronales implica valores escalares, vectores y matrices, resulta prudente el mencionar que para este trabajo se empleó la siguiente notación:

- Escalares: minúsculas e itálicas *a, b, c*

- Vectores: minúsculas en negrillas **a, b, c**
- Matrices: mayúsculas y negrillas **A, B, C**

Una vez considerado lo anterior, la red neuronal que se desarrolló en este trabajo, fue del tipo, "Feed-forward Backpropagation", empleando el comando *net=newff* para crear la red.

Dado que los valores de entrada (variables meteorológicas y químicas) ingresan con un arreglo matricial, fue necesario ingresar la base de datos en un arreglo de 9 x 1308 (renglón x columna), donde cada columna es el grupo de las 9 variables para cada día.

Este tipo de modelos tiene como finalidad el reducir la diferencia entre el valor estimado y el valor real de ozono (valor objetivo), siendo esta diferencia el error; por lo que fue necesario ingresar como vector objetivo los valores de ozono reales presentados en cada día del bloque 1998-2001, con una dimensión de 1 x 1308.

Para el desarrollo de la red, el comando *newff* requiere de los siguientes elementos:

$$\text{NEWFF} = (\text{PR}, [S_1 \ S_2 \ \dots \ S_i], \{\text{TF}_1 \ \text{TF}_2 \ \dots \ \text{TF}_i\}, \text{BTF}, \text{BLF}, \text{PF})$$

PR= matriz R x 2 del valor mínimo y máximo para cada elementos de entrada en la columna R, es decir cada día con sus 9 variables, para con esto normalizar los datos y colocarlos en escala de 0 a 1.

S_i= tamaño de la capa (número de nodos en cada capa), para i capas. En el desarrollo de esta red se emplearon 2 capas, siendo la segunda la de salida con un solo nodo, para obtener los valores estimados de ozono.

TF_i= es la función de transferencia emplead en cada capa, empleando para la primer capa una función log-sigmoidal (*logsig*) y en la capa de salida una lineal (*purelin*).

BTF= función de entrenamiento de la red de retropropagación, aplicando Levenberg-Marquardt (*TRAINLM*), para llegar a la convergencia y con esto

minimizar el error, siendo esta función muy rápida pero con requerimientos altos de memoria al correrla.

BLF= función de aprendizaje de retropropagación para pesos y vectores de sesgo, aplicando la función de gradiente descendente con momentum (*LEARNGDM*).

PF= función de desempeño, aplicando tres tipos: Media del cuadrado del error (*MSE*), media del cuadrado del error con regularización (*MSEREG*) y suma del cuadrado del error (*SSE*).

El algoritmo de la función de entrenamiento, aprendizaje, desempeño y transferencia serán abordados a detalle en la sección 5.2.2 de este capítulo.

De manera general entonces, hablamos de una red de retropropagación con una matriz de entrada de valores, conteniendo 9 variables en cada columna representando a cada día de la base de datos 1998-2001.

Estos valores de entrada pasarán por una primer capa con N nodos (6 ó 12 explicados en la sección 5.2.2), para crear una matriz de pesos de tamaño N x 9 (renglón x columna) y un vector de sesgo de tamaño N x 1, aplicando una función de transferencia log-sigmoidal (*LOGSIG*).

Los valores que surjan del paso de la primer capa, serán ahora las entradas a la segunda y última capa (salida) que contó con 1 nodo generando un nuevo vector de pesos de tamaño 1 x Nn, refiriéndonos con Nn al número de datos que son arrojados de la primer capa (ej. si en la primer capa se tienen 6 nodos N, serán ingresados a la segunda capa 6 valores Nn) y un vector de sesgo 1 x 1, es decir un escalar.

La función de transferencia en la última capa será lineal (*PURELIN*), para con esto tener los valores estimados de ozono (1308) que serán comparados con los valores objetivo o reales de ozono para cada día.

De forma esquemática se puede ver en la figura 5.6 la estructura de la red de retropropagación, considerando dos capas, conteniendo la primera 6 nodos y la segunda 1 nodo de salida, para una matriz de entrada de 9 valores por columna.

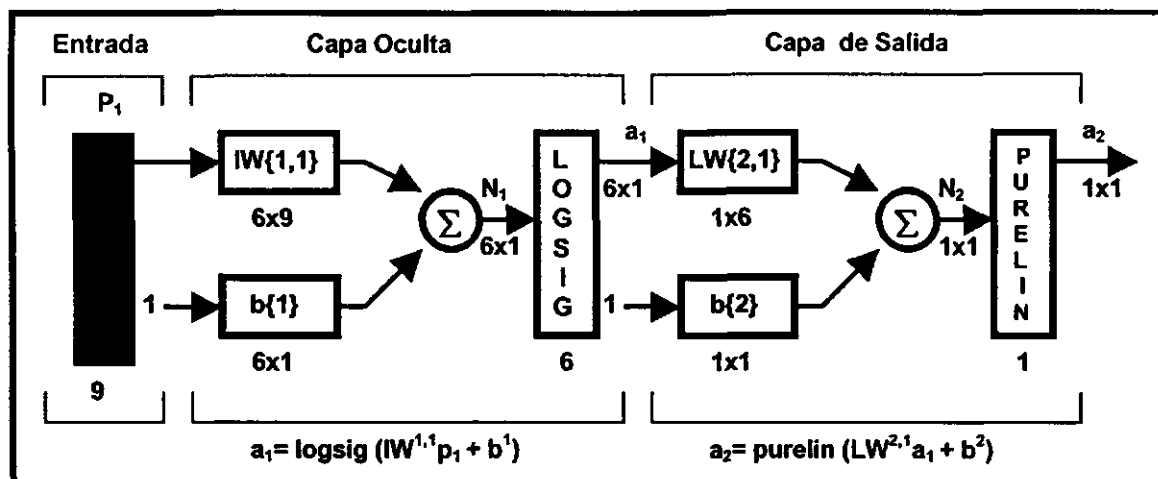


Figura 5.6 Esquema de una red de retropropagación del tipo Feed-forward, con una estructura de 9 x 6 x 1 (entrada x oculta x salida).

El modelo de red diseñado para este trabajo contará, en resumen con las siguientes características:

- Red de retropropagación de tipo Feed-forward con 2 capas, la primera con variación en el número de nodos de 6 a 12 y la segunda (salida) con 1 nodo.
- Contiene una función de entrenamiento *TRAINLM*
- Una función de aprendizaje *LEARNGDM*
- Las funciones de desempeño fueron: *MSE*, *MSEREG* y *SSE*.
- La función de transferencia para la primer capa (oculta) fue *LOGSIG* y para la segunda capa (salida) *PURELIN*.

En total se desarrollaron 6 redes (tres de 9x6x1, y tres de 9x12x1) que fueron entrenadas y comparadas en su desempeño (en modo de entrenamiento). El entrenamiento se varió comparando las tres diferentes funciones de desempeño (*MSE*, *MSEREG* y *SSE*), una vez hecho el entrenamiento y obtenidos los pesos y vectores de sesgo para cada capa, se simuló las redes para los datos correspondientes al 2002, evaluando su desempeño real.

5.2.2. Entrenamiento de la Red Neuronal.

Una vez hecha la selección estructural de la red con sus diferentes funciones, se procedió a entrenarla. El entrenamiento tiene como finalidad, estimar las matrices de pesos y vectores de sesgo para cada capa, para con esto obtener un valor de concentración de ozono, buscando la menor diferencia entre lo observado y el estimado. Ya teniendo las matrices de pesos, se podrá aplicar esta red para simular, es decir en modo pronóstico, abordando esta simulación en la siguiente sección.

Se optó por hacer 2 estructuras diferentes de red: la primera, consta en su capa oculta de 6 nodos de transferencia resultando en una red de 9x6x1, la segunda, con 12 nodos de transferencia en la capa oculta dando una red de 9x12x1; teniendo ambas redes una capa de salida con un solo nodo y 9 variables de entrada. Hacer el cambio en el número de nodos en la capa oculta servirá para ver si existe un aumento significativo en la eficiencia de la red respecto a una estructura más sencilla (de menos nodos en la primer capa).

La función de entrenamiento aplicada fue de Levenberg-Maquardt (*TRAINLM*) para optimizar y ajustar los pesos y vectores de sesgo, según la ecuación 32. Los requerimientos y la estructura de esta función se presentan en el Anexo I "Funciones de redes neuronales". El algoritmo Levenberg-Maquardt, fue diseñado para hacer una aproximación de segundo-orden, haciendo un entrenamiento rápido sin necesidad de estar calculando la matriz Hessiana, sino que hace una aproximación de dicha matriz de la siguiente manera:

$$H = J^T J \quad (23)$$

y el cálculo del gradiente como:

$$g = J^T e \quad (24)$$

donde J es la matriz jacobiana que contiene las primeras derivadas del los errores de la red respecto a los pesos y vectores de sesgo, y e es el vector de errores en la red. Por lo que, el algoritmo de Levenberg-Maquardt, empleando la aproximación a la matriz Hessiana, será:

$$x_{k+1} = x_k - [J^T J + \mu I]^{-1} J^T e \quad (25)$$

donde I es la matriz de identidad y μ es un valor de adaptación (escalar) con un valor inicial $\mu = 0.001$, que será ajustado con la función de desempeño (MSE , $MSEREG$, SSE) para minimizar el error.

Dado que este método demanda alta capacidad de memoria para su desarrollo, se aplica un ajuste para reducir la memoria. El ajuste consiste en dividir el Jacobiano en dos submatrices iguales, para aproximar la matriz Hessiana:

$$H = J^T J = [J_1^T \ J_2^T] [J_1 \ J_2]^T = J_1^T J_1 + J_2^T J_2 \quad (26)$$

por lo que la matriz Hessiana, resultará de una sumatoria de una serie de subtérminos.

Para determinar el término α de la ecuación 32, se aplicó una función de aprendizaje de gradiente descendente con momentum para los pesos y sesgos " $LEARNINGDM$ ". En el Anexo I "Funciones de redes neuronales" se presentan sus requerimientos y estructura. Esta función determina el cambio de pesos dW para las diferentes neuronas, considerando los valores de entrada y el error, resultando en la siguiente expresión:

$$dW = mc * dW_{prev} + (1-mc) * lr * gW \quad (27)$$

donde mc es la constante de momentum con un valor de $mc = 0.9$, dW_{prev} es el cambio de pesos previo calculado por el programa, lr es la razón de aprendizaje con un valor $lr = 0.01$ y gW gradiente de pesos respecto al desempeño.

Se aplicaron 3 diferentes funciones de desempeño, para con esto obtener gW de la ecuación 37 y el valor de μ de la ecuación 32: Media del cuadrado del error (MSE), media del cuadrado del error con regularización ($MSEREG$) y suma del cuadrado del error (SSE); para ambas estructuras de redes ($9 \times 6 \times 1$ y $9 \times 12 \times 1$), con la finalidad de observar si existe cambio significativo en el desempeño de la red al aplicar alguna de estas. Los requerimientos y estructura de estas funciones de desempeño se muestran en el Anexo I "Funciones de redes neuronales".

La función MSE mide el desempeño de la red de acuerdo a la media del cuadrado de sus errores, considerando los valores de entrada y los valores

objetivo (ozono observado) $\{p_1, t_1\}, \{p_2, t_2\}, \dots, \{p_N, t_N\}$, así como el error e ($e = t - a$, donde a es el valor estimado de ozono), tal que:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (e_i)^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (t_i - a_i)^2 \quad (28)$$

La función *MSEREG* mide el desempeño de acuerdo a la media del cuadrado del error con regularización. Esta mide el desempeño como la suma de pesos de dos factores: la media del cuadrado del error (*MSE*), y la media del cuadrado de los pesos y vectores de sesgo (*MSW*).

$$MSEREG = \gamma MSE + (1 - \gamma) MSW \quad (29)$$

donde γ es la razón de desempeño, y

$$MSW = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n w_j^2 \quad (30)$$

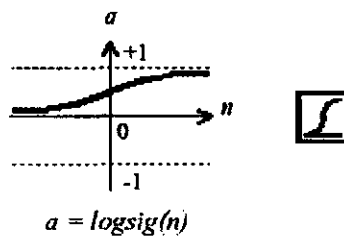
Por último la suma del cuadrado del error (*SSE*) para medir el desempeño:

$$SSE = \sum_{i=1}^N (t_i - a_i)^2 \quad (31)$$

Las funciones de transferencia aplicadas fueron las siguientes:

- En la primer capa una función Log-sigmoidal (*LOGSIG*) (se presentó en el capítulo 2 de este trabajo), siendo esta una función diferenciable, tomando cualquier valor entre menos y mas infinito, reduciéndolos a valores de salida en el rango entre 0 y 1 tal que la expresión matemática será:

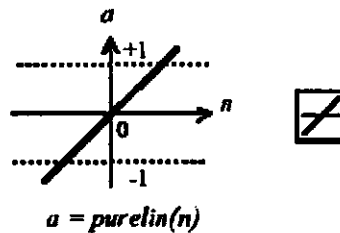
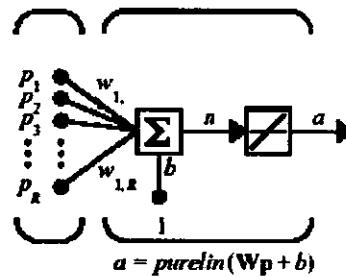
$$Logsig(n) = 1 / [1 + \exp(-n)]$$



- En la segunda capa (salida), se empleó una función de transferencia lineal, para obtener los valores correspondientes de ozono estimado, tomando como entradas a la función los valores emitidos por las neuronas de la capa oculta. Esta función lo que hace es calcular los valores de salida de la(s) neurona(s) de la siguiente manera:

$$Purelin(n) = purelin [(Wp) + b] = (Wp) + b$$

donde **W** es la matriz de pesos, **p** son los valores de entrada (emitidos por la capa oculta, 6 ó 12 según el caso) y **b** es el vector de sesgos.



Una vez explicadas las diferentes funciones aplicadas en la red, definiremos lo siguiente: 1) Las redes con estructura 9x6x1 serán la R3, R4 y R5 con diferentes funciones de desempeño cada una, siendo la función MSE, MSEREG y SSE respectivamente; 2) Las redes con estructura 9x12x1 serán la R6, R7 y R8, correspondiéndoles en el mismo orden que las anteriores funciones de desempeño.

Las redes fueron alimentadas con una matriz de 9 x 1308 correspondiendo al periodo 1998-2001, obteniendo como resultado del entrenamiento, la matriz de pesos y vectores de sesgo, así como valores de ozono que fueron comparados con los observados para determinar el error.

Una vez obtenidos los valores de ozono (estimados), se les aplicó un análisis estadístico para ver sus diferencias (tabla 5.11) entre los resultados emitidos por cada una de las redes respecto a los valores de ozono observados, así como las diferencias entre las redes.

En la tabla 5.11, podemos notar que todas las redes guardan un valor muy próximo a la media observada, así como al valor de su desviación (excepto la R5). Si nos centramos en el rango de valores entre el mínimo y el máximo, las redes con estructuras de 9x12x1 resultaron con un espectro mayor, es decir con un mínimo y máximo próximo al observado, tal que si observamos la R6 muestra un mínimo de 8.97 y el mayor máximo de 97.43.

Se aplicó también un comparativo entre cada una de las redes respecto a los valores de ozono observado por medio de una regresión lineal, para con esto determinar su valor de R^2 (tabla 5.12) y ver que red tenía una mejor correlación respecto al valor real. Los programas para cada red, así como su matriz de pesos y sesgos de cada una, serán presentados en el Anexo II "Programas de Redes Neuronales".

Al comparar el grado de correlación (tabla 5.12), notamos que el valor de $R^2 = 0.562$ máximo se obtiene con la red R6, es decir una red de 9x12x1 con una función de desempeño MSE. En la figura 5.7 se presenta una regresión lineal entre el ozono observado y el pronóstico por la red R6 en fase de entrenamiento.

TABLA 5.11 Análisis estadístico del ozono estimado por las diferentes redes neuronales en fase de entrenamiento.

	Ozono Observado	Red 9x6x1			Red 9x12x1		
		R3 MSE	R4 MSEREG	R5 SSE	R6 MSE	R7 MSEREG	R8 SSE
Media	54.040	53.979	54.054	54.038	54.056	54.081	54.093
Desviación Estándar	26.581	18.409	19.389	38.228	19.932	19.449	18.916
Mínimo	1.5	26.284	10.390	9.293	8.968	5.556	8.635
Máximo	177.5	96.808	96.172	93.673	97.432	94.679	93.180

TABLA 5.12 Correlación (R^2) entre el ozono observado y los valores de ozono estimados por las diferentes redes en fase de entrenamiento, aplicando una regresión lineal.

Observado vs. R3	$R^2= 0.488$	Observado vs. R6	$R^2= 0.562$
Observado vs. R4	$R^2= 0.540$	Observado vs. R7	$R^2= 0.526$
Observado vs. R5	$R^2= 0.543$	Observado vs. R8	$R^2= 0.545$

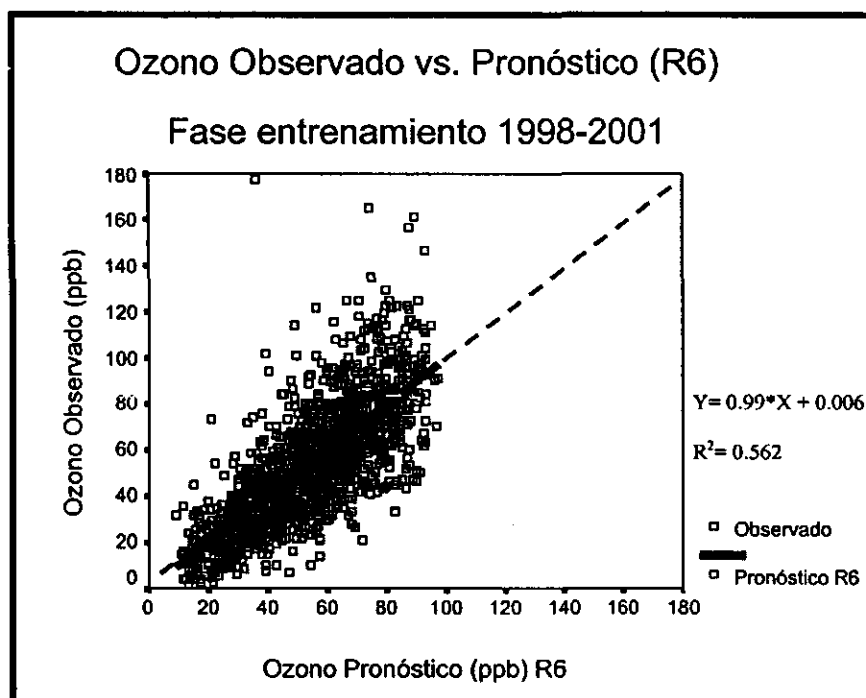


Figura 5.7. Relación entre valores de concentración de ozono (ppb) respecto a concentraciones pronosticadas (ppb) con la red R6 en fase de entrenamiento, aplicando una regresión lineal.

Como se puede apreciar en la figura 5.7, prácticamente la línea de pronóstico R6 se empalma con la línea de regresión ideal ($m=1, b=0$), obteniendo como pendiente para R6 $m= 0.999$ e intersección $b=0.006$, considerando con esto que los arreglos en la estructura de redes son adecuados.

Una vez obtenidos los resultados expuestos en las tablas 5.11 y 5.12, se compararon los porcentajes de aciertos que presentaron cada una de las redes

respecto a los valores de ozono observado. La metodología para este análisis fue la misma empleada que en el caso del modelo de Regresión no Lineal, es decir se compararon en los diferentes estándares de calidad ambiental (EPA y NOM-020).

En la tabla 5.13 se muestra el porcentaje de veces que se acertó en los rangos de concentración de ozono (ppb) obtenidos por los modelos de Redes respecto a los valores observados, para los años en conjunto del periodo 1998-2001.

TABLA 5.13 Porcentaje de aciertos de los valores de ozono estimados en fase de entrenamiento por las diferentes redes, respecto a los valores observados de ozono, para el periodo en conjunto de 1998-2001.

	Ozono en ppb				Ozono en ppb		
	<80	80-120	>120		<60	60-110	>110
Observado	1092	198	18	Observado	790	479	39
R3	1042 95.42%	69 34.85%	0 0.00%	R3	654 82.78%	343 71.62%	0 0.00%
R4	1044 95.60%	61 30.81%	0 0.00%	R4	632 80.00%	363 75.78%	0 0.00%
R5	1038 95.05%	68 34.34%	0 0.00%	R5	628 79.49%	371 77.45%	0 0.00%
R6	1034 94.69%	72 36.36%	0 0.00%	R6	652 82.53%	365 76.20%	0 0.00%
R7	1040 95.24%	65 32.83%	0 0.00%	R7	643 81.39%	359 74.98%	0 0.00%
R8	1054 96.52%	59 29.80%	0 0.00%	R8	630 79.75%	356 74.32%	0 0.00%

Si observamos el desempeño en la fase de entrenamiento, podremos notar que es muy similar entre las diferentes redes, tal que, si sumamos el número de veces que se acertó al valor real, la red R6 será la que mayor certeza mostró respecto a las demás redes con un total de 1106 aciertos en el rango de la EPA, y de 1017 aciertos en el rango de la NOM; en el caso del R8 fueron correctos 1113 para la EPA y 986 para la NOM por lo que se considera un desempeño mejor de la R6 aunque la diferencia no es significativa.

Resulta evidente, como en ninguna de las diferentes redes se logran detectar concentraciones de ozono superiores a la norma, hecho similar al de los modelos de regresión.

Hay que recordar, que los valores de ozono estimados en la fase de entrenamiento de redes no cuentan con un incremento al valor estimado; hecho que si se presentó en el modelo de Regresión (factor de incremento de 1.3), recordando la siguiente expresión:

$$\hat{O}_3 = I * \hat{O}_3i$$

donde I representa el incremento, \hat{O}_3i es la concentración de ozono (ppb) estimada por el modelo y \hat{O}_3 es la concentración pronóstico final.

Tal que, para fines comparativos y para alcanzar a detectar valores de ozono que sobrepasen la norma por medio de los modelos de Redes, se multiplicará el ozono estimado por un incremento de 1.3, siendo este el mismo empleado en el modelo de Regresión, mostrando los resultados en la tabla 5.14.

TABLA 5.14 Porcentaje de certeza de los valores de ozono estimados en fase de entrenamiento por las diferentes redes aplicando un incremento de 1.3, respecto a los valores observados de ozono, para el periodo en conjunto de 1998-2001.

	Ozono en ppb				Ozono en ppb		
	<80	80-120	>120		<60	60-110	>110
Observado	1092	198	18	Observado	790	479	39
R3	798 72.25%	153 77.27%	5 27.78%	R3	477 60.38%	394 82.25%	14 35.90%
R4	770 70.51%	167 84.34%	0 0.00%	R4	436 55.19%	422 88.10%	14 35.90%
R5	742 67.95%	169 85.35%	0 0.00%	R5	434 54.94%	422 88.10%	12 30.77%
R6	777 71.15%	163 82.32%	1 5.56%	R6	448 56.71%	406 84.76%	15 38.46%
R7	767 70.24%	167 84.34%	0 0.00%	R7	437 55.32%	409 85.39%	15 38.46%
R8	755 69.14%	166 83.84%	0 0.00%	R8	454 57.47%	420 87.68%	12 30.77%

Se realizó una regresión lineal (figura 5.8) de la concentración de ozono observado (ppb) respecto al pronóstico (ppb) para la red R6 pero aplicando ahora un incremento de 1.3 que permitió el poder pronosticar valores de concentración de ozono excedentes a la norma.

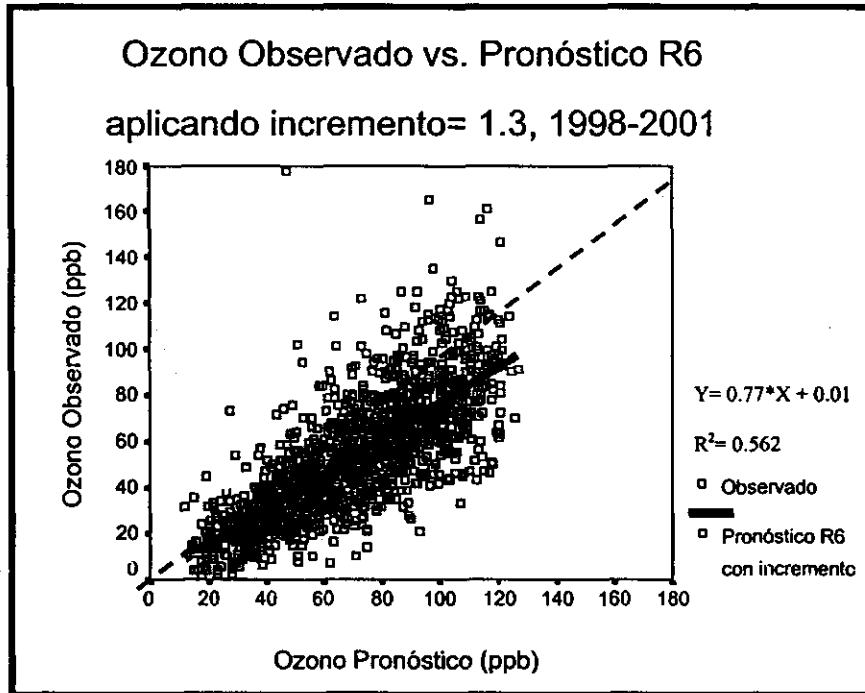


Figura 5.8 Relación entre valores de concentración de ozono (ppb) respecto a concentraciones pronosticadas (ppb) con la red R6 en fase de entrenamiento con incremento de 1.3, aplicando una regresión lineal.

Si comparamos la figura 5.7 con la 5.8, notaremos que al aplicar el incremento sí se logra detectar concentraciones de ozono (ppb) superiores a la norma, pero saliendo de la línea ideal, encontrando para la figura 5.8 una pendiente $m = 0.77$, pero el mismo valor de $R^2 = 0.562$.

Para fines prácticos en la figura 5.9 se muestra de manera gráfica una serie de tiempo de ozono observado y ozono estimado en la fase de entrenamiento para la red R6 (sin incremento).

Dado que el desempeño de las redes en la fase de entrenamiento es muy similar, se optó por guardar de cada una las matrices de pesos producto del

entrenamiento, para con esto probar a cada una en la fase de simulación sobre la base de datos del 2002, dado que resultaría muy tajante el decir que una sola red es mejor al resto, descartando con esto al resto; siendo que las diferencias entre ambas son mínimas. Los resultados de la simulación se muestran en la siguiente sección.

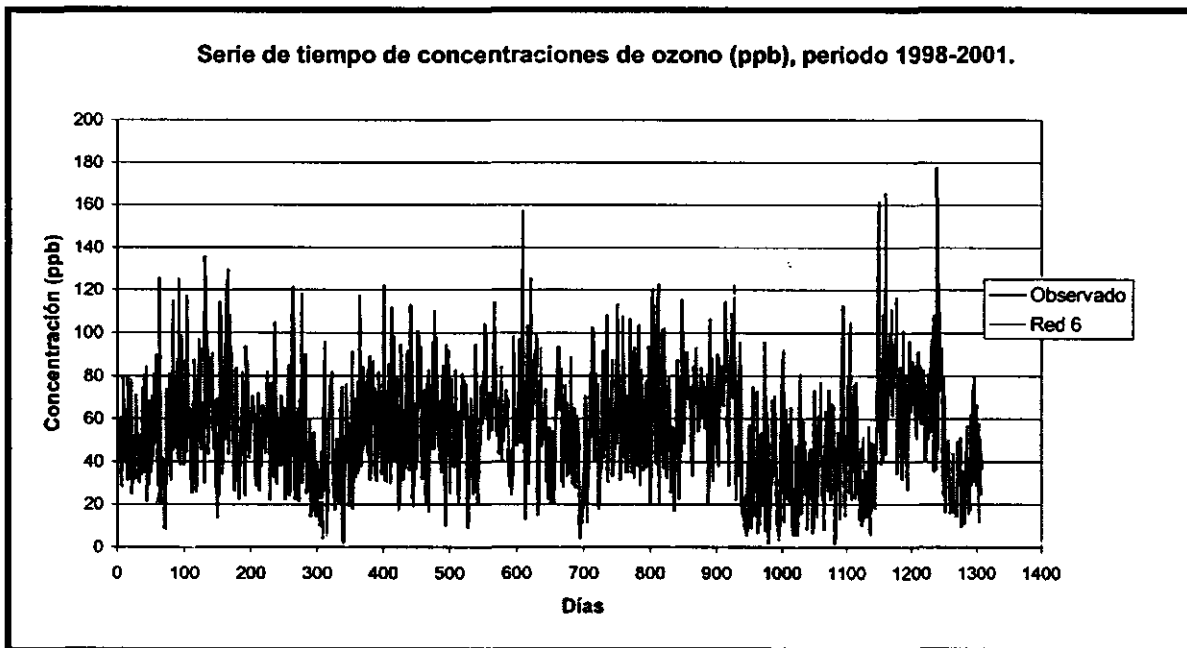


Figura 5.9 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) en fase de entrenamiento para la Red Neuronal R6 (sin incremento), correspondiente al periodo 1998-2001.

5.2.3. Simulación de la Red Neuronal.

Ya teniendo las matrices de pesos y sesgos para cada capa, se ingresa la base de datos del 2002, con la finalidad de evaluar el desempeño real de los modelos de redes.

La base de datos, igual que la de entrenamiento, ingresa con un arreglo matricial, tal que las dimensiones de la matriz de entrada serán de 9 x 331 correspondiendo a datos diarios de Enero a Noviembre del 2002. Ahora los valores del vector objetivo cambiarán, ingresando un vector de 1 x 331, siendo estos los datos de ozono observado y la base para evaluar el desempeño.

Al correr los modelos, se obtienen los valores de ozono estimados en modo pronóstico o simulado; a estos valores se les determinó el porcentaje de certeza real en los diferentes bloques de calidad ambiental (EPA y NOM).

A los valores de ozono obtenidos de cada red simulada (R3, R4, R5, R6, R7, y R8) se les aplicó un análisis estadístico para comparar los estimados que cada una obtiene respecto a las concentraciones de ozono observadas, mostrando los resultados en la tabla 5.15, a partir de este momento las redes simuladas estarán definidas como SR3, SR4, ..., SR8.

TABLA 5.15 Análisis estadístico del ozono estimado por las diferentes redes neuronales en fase de simulación.

	Ozono Observado	Red 9x6x1			Red 9x12x1		
		SR3 MSE	SR4 MSEREG	SR5 SSE	SR6 MSE	SR7 MSEREG	SR8 SSE
Media	54.92	54.04	53.78	53.46	53.68	53.58	53.33
Desviación Estándar	26.03	19.07	19.04	19.36	19.63	19.12	20.38
Mínimo	3.50	9.66	15.42	12.78	10.61	15.84	11.17
Máximo	143.50	97.52	93.87	95.01	90.47	94.71	100.08

Como en el caso de la fase de entrenamiento, los resultados entre las simulaciones y los valores observados son muy próximos. Podríamos decir que en el caso de la simulación la SR8 es la que pudiese otorgarnos una mejor desempeño al estimar concentraciones de ozono sobre la norma, ya que tiene un máximo de 100 ppb, siendo este el mayor respecto al resto de las redes; sin embargo resultaría muy tajante el decir que es la de mejor desempeño sin considerar otros puntos como el valor de R^2 y la certeza en los rangos.

Para ver que tan bien correlacionados están los valores estimados, se realizó (igual que en la fase de entrenamiento) una regresión de tipo lineal entre el ozono observado y los valores pronosticados, obteniendo los resultados mostrados en la tabla 5.16.

TABLA 5.16 Correlación (R^2) entre el ozono observado y los valores de ozono estimados por las diferentes redes en fase de simulación, aplicando una regresión lineal.

Observado vs. SR3	$R^2= 0.561$	Observado vs. SR6	$R^2= 0.576$
Observado vs. SR4	$R^2= 0.580$	Observado vs. SR7	$R^2= 0.566$
Observado vs. SR5	$R^2= 0.575$	Observado vs. SR8	$R^2= 0.586$

Al comparar los valores de R^2 , resulta que el máximo lo alcanza al correr la red SR8 con una $R^2= 0.586$; sin embargo todas las simulaciones tienen valores altos de correlación y sobrepasan a todos los valores de R^2 encontrados en la fase de entrenamiento para cada red, lo que nos habla en general de un buen resultado. En la figura 5.10 se presenta una regresión lineal entre el ozono observado y el pronóstico por la red SR8 en fase de simulación.

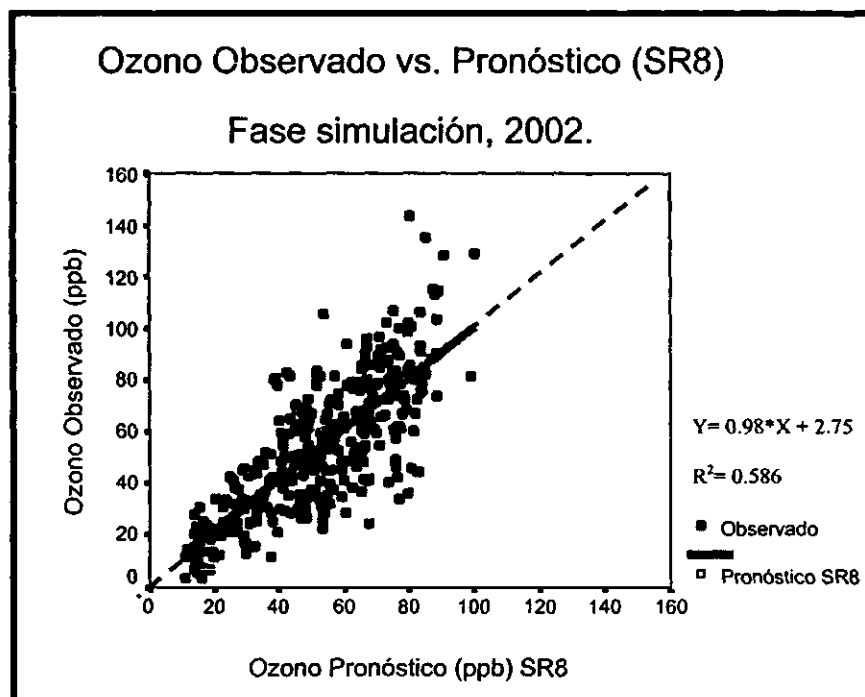


Figura 5.10 Relación entre valores de concentración de ozono (ppb) respecto a concentraciones pronosticadas (ppb) con la red SR8 en fase de simulación, aplicando una regresión lineal.

Por último, la manera más clara de constatar el desempeño real, es evaluar que tanto porcentaje de certeza mostraron los valores estimados respecto a los reales, por lo que en la tabla 5.17 se muestra el porcentaje de certeza de las simulaciones para cada simulación.

TABLA 5.17 Porcentaje de certeza de los valores de ozono estimados en fase de simulación por las diferentes redes, respecto a los valores observados de ozono, para el 2002.

	Ozono en ppb				Ozono en ppb		
	<80	80-120	>120		<60	60-110	>110
Observado	270	57	4	Observado	189	135	7
SR3	256 94.81%	18 31.58	0 0.00%	SR3	155 82.01%	94 69.63%	0 0.00%
SR4	261 96.67%	16 28.07%	0 0.00%	SR4	160 84.66%	98 72.59%	0 0.00%
SR5	263 97.41%	15 26.32%	0 0.00%	SR5	157 83.07%	98 72.59%	0 0.00%
SR6	262 97.04%	13 22.81%	0 0.00%	SR6	153 80.95%	97 71.85%	0 0.00%
SR7	257 95.19%	12 21.05%	0 0.00%	SR7	160 84.66%	94 69.63%	0 0.00%
SR8	260 96.30%	14 24.56%	0 0.00%	SR8	155 82.01%	96 71.11%	0 0.00%

En la tabla anterior, notaremos que las eficiencias en el desempeño real por las diferentes redes son muy similares, sin embargo, de la misma manera que los modelos de Regresión, las Redes por si mismas no pudieron detectar valores de concentración de ozono de excedencia a la norma. Los porcentajes presentados en la tabla 5.17, resultan de contabilizar el número de ocasiones en que los estimados por de concentración de ozono obtenidos por la diferentes redes aciertan a las concentraciones de ozono observado, en los diferentes rangos de calidad ambiental.

Bajo los resultados presentados en la tabla 5.17, el desempeño global de las redes (sin incremento), resulta de:

1. Bloque de la EPA.- Eficiencia Global SR3 de 82.78%
Eficiencia Global SR4 de **83.68%**
Eficiencia Global SR5 de **83.99%**
Eficiencia Global SR6 de 83.08%
Eficiencia Global SR7 de 81.27%
Eficiencia Global SR8 de 82.78%

2. Bloque de la NOM.- Eficiencia Global SR3 de 75.23%
Eficiencia Global SR4 de **77.95%**
Eficiencia Global SR5 de **77.04%**
Eficiencia Global SR6 de 75.53%
Eficiencia Global SR7 de 76.74%
Eficiencia Global SR8 de 75.83%

Resultando las redes de desempeño más alto la SR4 y SR5, sin aplicar incremento; recordando que la red R4 y R5 tienen una estructura de 9x6x1, contando la primera con una función de desempeño *MSEREG* y la segunda con *SSE*.

Si aplicamos el incremento de 1.3 a los valores de ozono estimados obtendremos los porcentajes de certeza presentados en la tabla 5.18. En dicha tabla se puede apreciar como al aplicar el incremento si se logran detectar valores de concentración de ozono que sobrepasan la norma, mostrando resultados de desempeño satisfactorios.

TABLA 5.18 Porcentaje de certeza de los valores de ozono estimados en fase de simulación por las diferentes redes aplicando un incremento de 1.3, respecto a los valores observados de ozono, para el año 2002.

	Ozono en ppb			Observado	Ozono en ppb		
	<80	80-120	>120		<60	60-110	>110
Observado	270	57	4	Observado	189	135	7
SR3	191 70.74%	45 78.95%	1 25.00%	SR3	109 57.67%	114 84.44%	3 42.86%
SR4	192 71.11%	48 84.21%	1 25.00%	SR4	112 59.26%	124 91.85%	4 57.14%
SR5	191 70.74%	46 80.76%	1 25.00%	SR5	107 56.61%	119 88.15%	5 71.43%
SR6	184 68.15%	48 84.21%	0 0.00%	SR6	115 60.85%	120 88.89%	4 57.14%
SR7	103 71.48%	45 78.95%	1 25.00%	SR7	110 58.20%	123 91.11%	4 57.14%
SR8	190 71.37%	46 80.70%	1 25.00%	SR8	105 55.55%	117 86.67%	6 86.71%

Bajo los resultados presentados en la tabla 5.17, el desempeño global de las redes con un incremento de 1.3, resulta de:

1. Bloque de la EPA.- Eficiencia Global SR3 de 71.60%
Eficiencia Global SR4 de **72.81%**
Eficiencia Global SR5 de 71.90%
Eficiencia Global SR6 de 70.10%
Eficiencia Global SR7 de 72.20%
Eficiencia Global SR8 de 71.60%

2. Bloque de la NOM.- Eficiencia Global SR3 de 68.28%
Eficiencia Global SR4 de **72.51%**
Eficiencia Global SR5 de 69.79%
Eficiencia Global SR6 de 72.20%
Eficiencia Global SR7 de 71.60%
Eficiencia Global SR8 de 68.88%

Resultando la red de desempeño más alto la SR4 al aplicar el incremento, aún cuando redes como la SR5 y SR8 detectaron mayor cantidad de concentraciones de ozono fuera de norma en los bloques de la NOM; mientras que para los bloques de la EPA solo la SR6 no detecto valores fuera de norma, y el resto de las redes detectaron 1 solo valor de 4. En la figura 5.11, se aplico una regresión lineal de la concentración de ozono observado (ppb) respecto al pronóstico (ppb) para la red SR4 aplicando ahora un incremento de 1.3 que permitió el poder pronosticar valores de concentración de ozono excedentes a la norma.

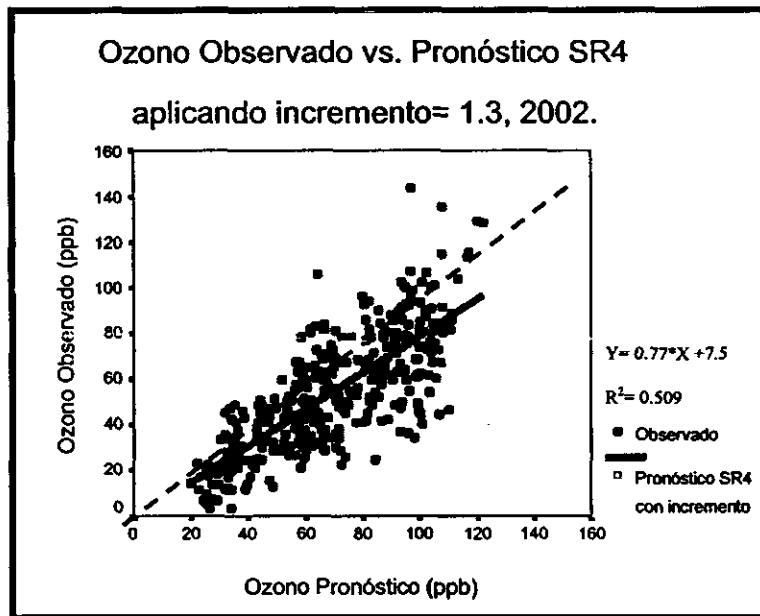


Figura 5.11 Relación entre valores de concentración de ozono (ppb) respecto a concentraciones pronosticadas (ppb) con la red SR4 en fase de simulación con incremento de 1.3, aplicando una regresión lineal.

Para ver el comportamiento en el tiempo de las concentraciones pronosticadas por las redes respecto a las concentraciones observadas, se presenta de manera gráfica en la figura 5.12 un comparativo entre el ozono observado y el estimado por la SR4 sin incremento y en la figura 5.13 los resultados de SR4 con incremento; además de la relación entre el ozono observado y los valores estimados por la SR8 con incremento (figura 5.14), dado que fue la que presento la mayor cantidad de datos acertados fuera de norma.

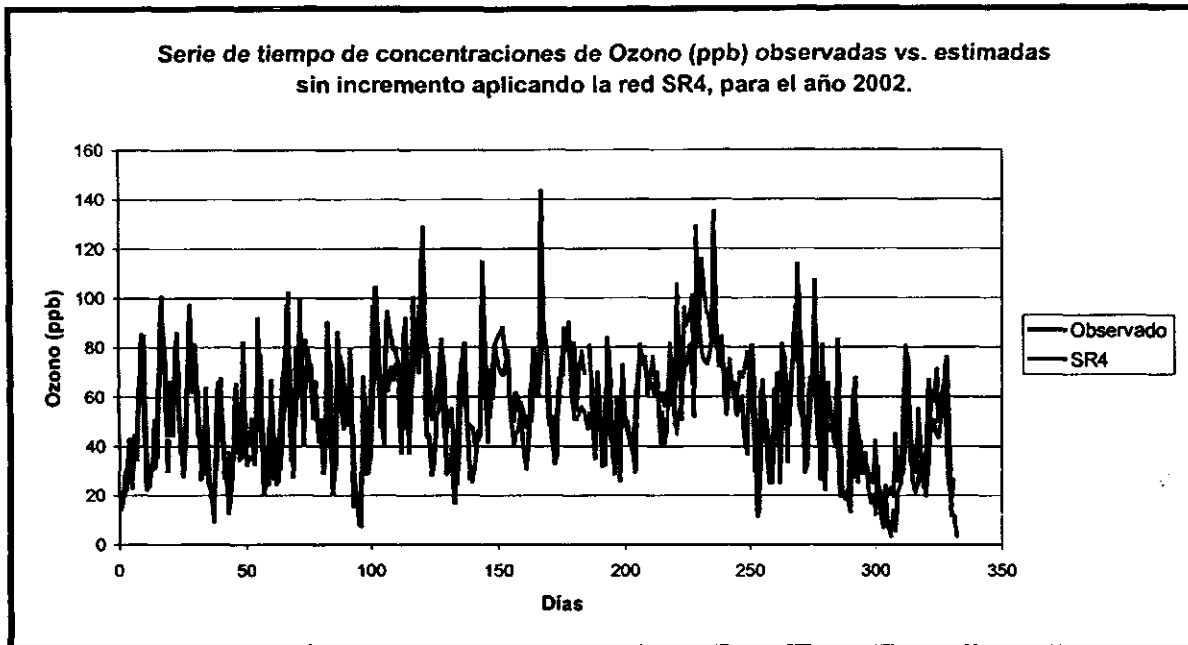


Figura 5.12 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) sin incremento aplicando la red SR4, para el año 2002.

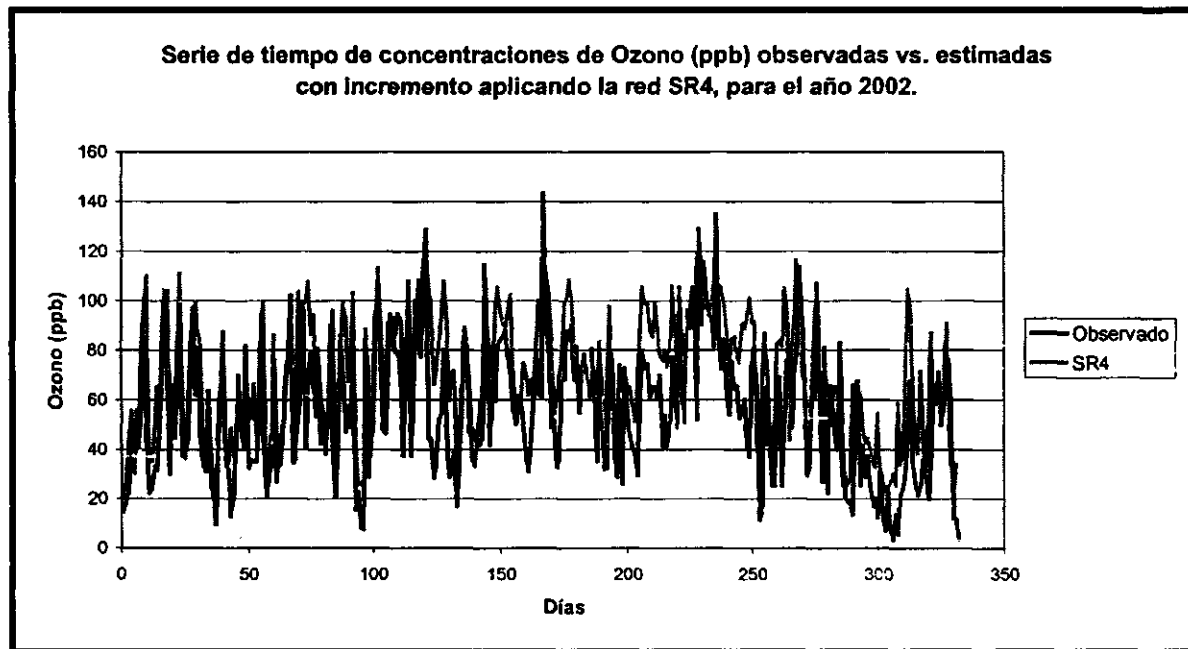


Figura 5.13 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) con incremento aplicando la red SR4, para el año 2002.

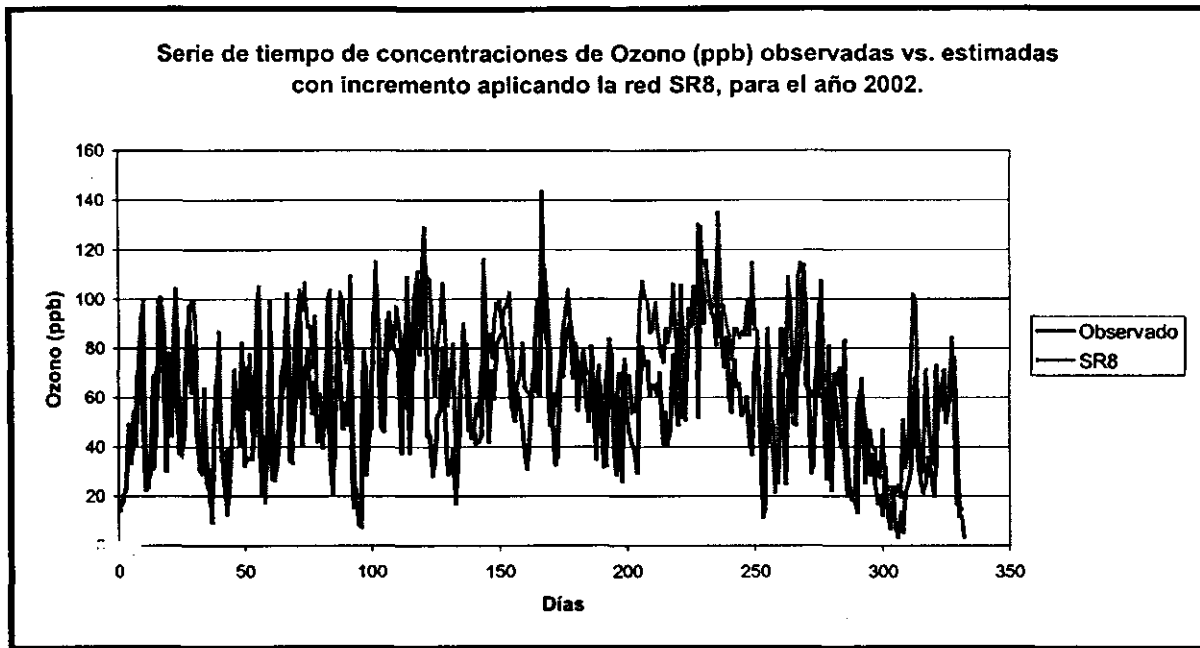


Figura 5.14 Serie de tiempo de concentraciones de ozono observado (ppb) y ozono estimado (ppb) con incremento aplicando la red SR8, para el año 2002.

DISCUSIÓN.

En este capítulo se tocarán algunos puntos relevantes de este trabajo, haciendo una discusión respecto al modelo de Regresión no lineal (RNL), al modelo de Redes Neuronales (RNA) y un comparativo entre ambos, resaltando algunas de sus fortalezas y debilidades.

6.1. Comparación con otros autores.

La estructura de los modelos consistió en 9 variables (meteorológicas y químicas), siendo las mismas para ambos (RNL y RNA), difiriendo en la forma en que fueron procesadas por cada uno de los modelos. Las variables empleadas fueron sometidas a una selección que consideraba diferentes aspectos, entre ellos: relación que guarda con el ozono, grado de correlación y explicación del por que de esto. Tal que, algunas de las variables seleccionadas fueron similares a las empleadas en otros estudios, como el caso de Cox y Chu (1993), Hubbard y Cobourn (1998), Cobourn *et al.*, (2000), entre otros. Sin embargo, los modelos que se presentan en este trabajo ingresan no solo variables meteorológicas, sino también químicas como ozono del día anterior, NO₂ y NO_x (15-23 hrs.) del día anterior; hecho que los autores antes citados en sus estudios no emplearon y solo se concretaron en variables meteorológicas o bien como el caso de Chang y Rudy (1993) en variables químicas únicamente.

El modelo RNA fue una red de Retropropagación con multicapas, dos para ser precisos. Esto debido a las características de este tipo de redes en cuanto a las funciones de transferencia (diferenciables y no lineales) que en ella se emplean, así como de su aplicación por diversos autores en este campo de ciencias atmosféricas (Gardner y Dorling, 1998). Autores como Cobourn, *et al.*, (2000) emplearon este tipo de redes con estructuras de dos capas, con dimensiones de 6x10x1, encontrando buenos resultados en su estudio. Otros

autores como Comrie (1997), también emplearon este tipo de redes con estructuras de 4x6x1 y 5x7x1, además de funciones de transferencia del tipo Logarítmica-sigmoidal.

Las redes diseñadas en este trabajo fueron de estructuras de 9x6x1 y 9x12x1, basándonos en estructuras presentadas por otros autores y el desempeño que mostraban al aplicarlas sobre la base de datos 1998-2001. La finalidad de generar estas dos estructuras de redes fue el evaluar si existe diferencia significativa en el desempeño al incrementar el número de nodos en la capa de transferencia u oculta, resultando para este trabajo que no existe diferencia significativa en el desempeño de la red al aumentar el número de nodos en la estructura.

Otro punto importante fueron las funciones de desempeño. Para el caso del estudio realizado por Comrie (1997) se empleó como función la raíz cuadrada de la suma del cuadrado de los errores (RMSE); mientras que en este trabajo se emplearon tres diferentes funciones: Media del cuadrado de los errores (MSE), media del cuadrado de los errores con regularización (MSEREG) y suma del cuadrado de los errores (SSE). El porque de este tipo de funciones, fue principalmente que de acuerdo al manual de usuario del software empleado para redes neuronales, estas tres funciones son las que tienen un mejor desempeño en este tipo de redes, y con esto se busca evaluar la eficiencia de la red con cada una de ellas. Encontrando en este estudio que no existe diferencia significativa al emplear una respecto a las otras.

Para evaluar el desempeño de los modelos (RNL y RNA) se generaron bloques en rangos de calidad ambiental conforme a la normatividad de la EPA y la NOM, tal que los bloques quedaron definidos en función de la afectación que podría tener la población al estar expuesta a ese rango de concentración del contaminante, resultando en tres niveles de calidad ambiental: **Bueno, Moderado y Malo**. Resultaría muy difícil lograr acertar de forma puntual un valor estimado respecto al observado, dada la complejidad del medio atmosférico. Por eso se usaron intervalos, resultando esto más práctico y en cierto punto de menor demanda de exactitud del modelo.

Los niveles de calidad ambiental que se presentaron fueron: <80 ppb, 80-120 ppb y >120 ppb en un caso, y <60 ppb, 60-110 ppb y >110 ppb para otro, respectivamente. Estudios como el desarrollado por Hubbard y Cobourn (1998), emplearon la misma metodología para evaluar el desempeño, considerando 4 niveles de calidad ambiental, siendo los siguientes: Buena <60 ppb, Moderada 60-95 ppb, Próximo a mala 95-120 ppb, y Mala >120 ppb; midiendo en cada nivel el porcentaje de veces que el modelo acertó respecto al observado, evaluando con esto el desempeño.

Al hacer la evaluación del desempeño, se encontró que ninguno de los modelos por si mismos logra detectar niveles de concentración de ozono superiores al máximo permisible por la normatividad, siendo este resultado no solo detectado en este estudio, sino de manera consistente observado en otros estudios como Comrie (1997), Hubbard *et al.*, (1998), Cobourn *et al.*, (2000), siguiendo modelos con estructuras similares y buscando el mismo objetivo de predicción de niveles de ozono.

Para lograr que los modelos RNL y RNA detecten valores altos de ozono se aplicó un factor de escalamiento o incremento. El incremento "I" es un valor que, una vez hecha la simulación del modelo y teniendo los valores pronóstico en el tiempo, estos se escalan en un dado porcentaje con lo que "sobrestimamos" la concentración de ozono que el modelo estaría estimando. Con esto se logra alcanzar a estimar concentraciones elevadas de contaminante, pero con una reducción de manera global en el porcentaje de aciertos que logra el modelo al aplicar el incremento. Sin embargo, se logra un aumento en los porcentajes de acierto en el nivel de calidad Moderado y principalmente en el nivel de calidad Malo o fuera de norma, los cuales son los niveles más relevantes.

En este trabajo el modelo RNL estimó correctamente 83, 70 y 0% en los niveles de calidad de aire (NOM-020) "buena" (<60 ppb), "moderada" (60-110 ppb) y "mala" (>110 ppb) sin incremento, respectivamente; y de 53, 93 y 71% de acierto al aplicar el incremento para los mismos niveles de calidad de aire, respectivamente. Si comparamos con estudios como el de Hubbard *et al.*, (1998), nuestro modelo RNL muestra un mejor desempeño, ya que, para el estudio de

Hubbard y colaboradores se reportan porcentajes de acierto de: 74, 80 y 40% para niveles de calidad "bueno" (<60 ppb), "moderado" (60 a 95 ppb), y "proximo a no-saludable" (95 a 120 ppb) en las diferentes categorías de calidad de aire, respectivamente. Sin embargo el modelo no estimó los valores de concentración de ozono superiores a 120 ppb sobre un periodo de 4 años (1993-1996) para las estaciones de ozono (Mayo a Septiembre).

El modelo RNA desarrollado en este trabajo, alcanzó porcentajes de acierto para la red SR4 (estructura 9x6x1, *MSEREG*) de 84, 73 y 0% para niveles de calidad de aire (NOM-020) "buena", "moderada" y "mala" sin incremento, respectivamente; y de 59, 92, 57% de acierto para los mismos niveles de calidad de aire aplicando un incremento, respectivamente. Se obtuvo un porcentaje máximo de acierto para la calidad de aire "mala" (NOM-020) de 86% con la red SR8 (9x12x1, *SSE*) aplicando un incremento. En un estudio desarrollado por Cobourn, *et al.*, (2000) se encontró un porcentaje de acierto a valores de excedencia a la norma de un 42% tanto para su modelo de Regresión como para el de Redes, teniendo en ese estudio la norma máxima de 110 ppb. Cualquiera de los modelos que presentamos en este trabajo sobrepasa el porcentaje de acierto que ellos logran para este nivel de calidad ambiental, aunque hay que considerar que los anteriores autores no hacen uso de un factor de escalamiento como aquí se hace.

Los estudios realizados por los autores antes mencionados sobre los que se realizó el análisis comparativo respecto a los modelos presentados en este trabajo guardan estructuras en los modelos y metodologías de desarrollo similares a las que aquí se emplearon, variando el lugar donde se desarrolló el estudio, el tiempo en el que se desarrolla y las condiciones en dicho momento. En general los estudios anteriormente citados crearon la base de datos para su análisis sobre la denominada "estación de ozono" para los diferentes años, dicha estación queda establecida por la EPA en los meses de mayo a septiembre, dado que en este periodo se perciben regularmente valores de concentración de ozono superiores a las 120 ppb, siendo este valor el límite máximo permisible por el National Ambient Air Quality Standard (NAAQS). En este trabajo la base de datos

contempló los valores de ozono presentados en todos los días del año para el periodo de 1998-2001 y de enero a noviembre del 2002, sin segregar los años en un periodo determinado. En un principio se consideró segregar cada año en bloques o meses específicos agrupados, considerando su comportamiento en el tiempo, estableciendo de manera general bloques de marzo a octubre (para el AMM), por considerar que en ese periodo se presentaban los valores máximos de ozono en el año. Para este estudio se obtuvieron mejores valores de correlación (R^2) sin realizar este acotamiento en los diferentes años, observando diferentes valores de R^2 para cada año por el modelo RNL y agrupando los 4 años (1998-2001) para generar con esto un modelo que no fuera específico para un año en particular.

6.2. Comparación RNL vs. RNA.

Al hacer un comparativo entre los modelos RNL y RNA presentados en este trabajo y decidir que modelo es mejor es una tarea difícil. En el capítulo 2 se mencionó que diferentes investigadores (Comrie, 1997; Soja y Soja, 1999; Cobourn *et al.*, 2000) tenían más apego a un modelo que a otro, mencionando tres opciones:

- 1.- Que los modelos de Regresión son mejores respecto al de Redes.
- 2.- Que los modelos de Redes son mejores respecto al de Regresión.
- 3.- Que prácticamente tienen el mismo desempeño ambos.

Este tipo de elecciones obedece a diversos factores, entre ellos gusto o afinidad por el investigador a cierto modelo, nivel de conocimiento en su estructura o funcionamiento, calidad de la base de datos, condiciones de la cuenca atmosférica o requerimientos computacionales que demanda cada modelo, además de un análisis estadístico de los resultados.

En este trabajo se encontró que ambos modelos mostraron un buen desempeño y que no hay una diferencia significativa entre ambos, por lo que los considero de igual desempeño. Ambos modelos tienen la gran ventaja de que pueden ser armados, entrenados y simulados en sistemas computacionales

modestos (una PC, una Lap-Top), cargar los software SPSS o MATLAB e ingresar la base de datos.

El tiempo de computo al correrlos es bajo para ambos, considerando una base de datos conformada por lecturas diarias para 4 años (aprox. 1460 días), conteniendo cada día 9 variables (meteorológicas y químicas) y el ozono observado, dando un total aproximado de datos a analizar de 14,600.

La consideración más importante es saber el comportamiento de lo que se quiere estudiar, tener nociones de los resultados esperados y crear una base de datos adecuada. Inclinarsse por cualesquiera de los modelos dependerá pues de que tan familiarizados estemos en esa estructura, la facilidad de ingreso de los datos, entre otros.

Las Redes Neuronales son más fáciles de estructurar respecto a los modelos de Regresiones. Los modelos RNL requiere de mayor tiempo para estructurarlos, ya que dependerá del grado de correlación que muestre respecto a la variable dependiente. En este estudio se realizó primero el modelo RNL, considerando esto provechoso, ya que la selección de las variable recae en esta técnica y la base de datos que ingresa al modelo RNA ya tiene entonces un análisis y procesamiento previo.

Es importante hacer mención que se tiene más control del modelo de RNL respecto al de RNA, ya que los cálculos en los nodos para los pesos son internos del sistema y únicamente se elige la función de transferencia, mientras que en el de RNL el usuario tiene más control en las operaciones al ver el cambio en los valores de los coeficientes de regresión.

Ambos modelos son fáciles de manipular, conociendo el funcionamiento del software donde se deseé correr, ambos son perfectibles y ambos podrán ser actualizados en el tiempo. Dicha actualización se basará en un aumento en la base de datos de calibración para con esto, en el caso de RNL realizar la pre-evaluación (back-casting) y en RNA el entrenamiento, obteniendo con esto una posible mejoría en el desempeño del modelo al contemplar una serie de tiempo mayor. El ingreso de estos valores podrá ser (a futuro) de forma continua conectado a la red de monitoreo, mientras que en este trabajo el desarrollo de los

modelos partió de datos otorgados por el SIMA, aplicándoles una metodología de control de calidad a los datos para su posterior ingreso.

En el desarrollo de los modelos, la etapa de preprocesamiento fue una parte muy importante, ya que es en esta etapa donde se estructura la base de datos que contendrá la información necesaria para los modelos; siendo la estructura de dicha base el paso que más tiempo demandó en la realización del trabajo, considerándolo pues como un paso limitante.

La base de datos como paso limitante, no solo compete a arreglo estructural de la base, sino también, a los datos que resultarán relevantes y/o importantes que se presenten en ella y los datos nulos. Para esto se empleó en primera instancia la selección de variables desarrollada en el capítulo 4, seguido de revisar las bases originales de datos proporcionadas por el SIMA y CNA para ver que datos eran inválidos (marcados por las fuentes originales con ND) o bien, datos que tenían concentraciones negativas y/o valores bajos próximos al límite de detección de los equipos. Entonces, una revisión y adecuación de las bases de datos originales es importante para definir la manera en que los datos ingresen bajo un sistema de control de calidad.

Ya una vez teniendo la base de datos conformada así como los modelos, aplicarlos es relativamente sencillo y rápido. Es cuestión únicamente de otorgar los valores de las variables que solicita el modelo en las unidades adecuadas y recordando que serán valores máximos.

Estos modelos podrán en un futuro ser alimentados de forma continua, estableciendo un programa de captación y selección de la información, teniendo en cuenta que para el AMM existen sistemas de monitoreo como el SIMA que proporciona datos diarios medidos cada hora de 0 a 23 hrs. para las variables que demanda el modelo, así como la estación del CNA que emite lecturas diarias de diferentes variables meteorológicas con reportes mínimos, máximos y promedio.

6.3. Parámetros mas importantes en la predicción de niveles de calidad del aire en el AMM.

Es también importante analizar estos modelos para saber los posibles y más importantes parámetros (variables meteorológicas y químicas) para la formación de contaminantes atmosféricos (ozono) en el AMM, recordando que este es uno de los objetivos de este trabajo.

Los modelos generados, dado su desempeño, nos muestran que el arreglo en su estructura, funciones matemáticas y variables consideradas si nos permiten poder estimar razonablemente bien el grado de contaminación que se pueda presentar dada una serie de variables químicas y meteorológicas pronosticadas para el día de interés. Hay que recordar que en este trabajo el desempeño real fue medido sobre una base de datos con lecturas observadas para el periodo del 2002 y no se llegó a evaluar el desempeño con parámetros meteorológicos y químicos pronosticados, hecho que resultará interesante y prudente el evaluar en estudios subsecuentes. Si bien las variables en conjunto otorgaron los resultados encontrados por los modelos, se pueden considerar algunas de estas como las variables más importantes dada su ingerencia respecto a la formación de ozono y su grado de correlación encontrado para el AMM. Retomando el análisis de las variables predictor desarrollado en el capítulo 4 y centrándonos en los resultados obtenidos en el modelo de RNL sobre la matriz de correlación de coeficientes, se pueden indagar los principales parámetros en la formación de ozono para el AMM.

El modelo RNL presentado en este trabajo (considerando los 4 años en conjunto 1998-2001) mostró un valor de R^2 de 0.522, tal que, si analizamos los valores de R^2 obtenidos por las diferentes variables respecto al ozono, tendríamos en orden descendente el siguiente para las tres más importantes: Temperatura, factor RST y Ozono anterior; tal que si a estas tres variables en conjunto les aplicamos una regresión no lineal, tendrán un valor de R^2 de 0.45 lo que nos muestra la importancia que guardan para la estimación de ozono, sin excluir al resto de las variables.

Si analizamos la matriz de correlación (Capítulo 5, sección 5.1.2), podremos detectar que coeficiente guarda una mejor relación con el resto, otorgando con esto la relación que pudiese existir entre las diferentes variables; tal que, a medida de que un par de coeficientes de aproxime a 1 mayor será su correlación, encontrando lo siguiente:

- Los coeficientes T_0 y T_1 correspondientes a la Temperatura, guardan mayor correlación con los coeficientes B_6 correspondiente al factor RST y B_5 correspondiente a la Presión. La relación del primero fue explicada con anterioridad recordando que el factor RST fue una de las tres variables principales en la estimación de ozono, mientras que la presión guarda una relación estrecha con la temperatura, además de influir la presión en los flujos de aire, moviéndose de regiones de alta a baja presión.
- El coeficiente B_6 correspondiente al factor RST, tiene mayor correlación con los coeficientes T_1 (Temperatura, explicado anteriormente), B_3 (Humedad relativa), B_4 (Precipitación) y W_2 (Velocidad del viento). La relación con la HR se produce ya que al incrementar la humedad en el medio (máximo un 80%) aumenta también la cantidad de transmisividad de radiación térmica proveniente del sol. La correlación con B_4 (Precipitación) se debe a que por lo general los días lluviosos son días nublados que reducen la cantidad de radiación que pudiese ingresar al ambiente, aunado a un lavado de la atmósfera.
- Los coeficientes NX_1 y NX_2 correspondientes a los NOx guardan una mayor correlación con N_1 y N_2 (NO_2), y W_1 y W_2 (Velocidad del viento). Con los primeros (N_1 y N_2) hay que recordar que los óxidos de nitrógeno NOx están constituidos principalmente por $NO + NO_2$, siendo estos los principales precursores en la formación de ozono, considerando para este trabajo la concentración máxima presente entre las 15 a las 23 hrs del día anterior, ya que este horario está fuera del fotolítico y las cantidades que se acumulen de estos óxidos en la tarde fungirán como materia prima el día siguiente, considerando a los NOx y el NO_2 únicamente. La correlación que guarda con los coeficientes W_1 y W_2 (Velocidad del viento) se debe a que

los óxidos (al igual que otros contaminantes) estarán expuestos a factores de transporte como lo es el viento.

- Por último el coeficiente F correspondiente al ozono del día anterior, tendrá una correlación principalmente con el N_2 y NX_1 recordando que estos pertenecen a los óxidos de nitrógeno y su relación tan estrecha que guardan en la formación de ozono.

Con lo anterior, se puede decir que para el AMM, las variables que presentan una mayor relevancia en la formación de ozono serán: Temperatura, factor RST, ozono anterior, velocidad del viento y óxidos de nitrógeno (NO_x y NO_2), considerando sus relaciones físicas y químicas existentes. Aunado a lo anterior, las características propias de Monterrey N.L., con circulación de viento reinante de Este a Oeste, con velocidades promedio de 18 Km/hr y máximas de 43 Km/hr, temperaturas promedio de 27°C y máximas de 42°C, ciudad altamente industrializada y rodeada de serranías como: Cerro de la Silla (SE), Sierra Madre Occidental (S), la Huasteca (SO), cerro de las Mitras (NO) y cerro del Topochico (NO), generan una estructura a la cuenca muy particular y patrones de dispersión específicos para el AMM.

6.4. Beneficios, aplicaciones y novedades que deja el trabajo.

De manera general, podemos considerar este trabajo novedoso para el AMM, ya que es la primera vez que se presenta este tipo de modelos de predicción de ozono aplicados a Monterrey N.L.

Los modelos que se presentan requieren datos de alimentación fáciles de obtener, considerando que en la región se cuenta con la red de monitoreo del SIMA y la central meteorológica del CNA. Estos datos son en su mayoría variables meteorológicas de fácil medición y fáciles de pronosticar, siendo: Temperatura máxima (°C), porcentaje de humedad relativa, velocidad del viento (Km/hr), presión (mbar), precipitación (mm) y nubosidad (OKT) en caso de no contar con

radiación solar total (RST), para el día de interés. Así como variables químicas presentes un día anterior al día de interés como: Ozono del día anterior (ppb), NO₂ de 15 a 23 hrs. del día anterior y NO_x de 15 a 23 hrs. del día anterior, otorgados principalmente por el SIMA.

Algo importante de los modelos presentes es, que a diferencia de otros modelos desarrollados por diferentes autores citados con anterioridad, éstos consideran tanto variables meteorológicas como químicas sin ser excluyentes, además de ingresar el que denominamos incremento "I" que permitió estimar valores excedentes a la norma, haciendo una "sobreestimación" de la concentración de ozono que el modelo estaría estimando.

Los modelos presentados en este trabajo, podrán ser usados como base para el desarrollo de modelos similares en otras ciudades como: Guadalajara, Valle de México, Toluca, Mexicali, Tijuana, León, ya que, al igual que Monterrey cuentan con redes automáticas de monitoreo atmosférico que brinden (principalmente) los valores de las variables químicas requeridas. Como ya se dijo, estos modelos podrán mejorarse y/o adecuarse a las necesidades propias de cada región, siempre considerando las características de la cuenca y sus patrones de dispersión.

Estos modelos tienen pues diferentes beneficios, tanto científicos al otorgar un entendimiento de los parámetros de formación de contaminantes, base para futuros estudios; así como en materia de salud (siendo una de las más importantes) ya que nos permitirán tomar medidas adecuadas de alertamiento a la población en tiempo preciso, para con esto adelantarnos a escenarios no deseados y contar con un ambiente adecuado para una buena calidad de vida, recordando los innumerables problemas que ocasionan contaminantes como el ozono a la población, principalmente a la más susceptible como lo son niños, ancianos y personas con problemas respiratorios. El adelantarnos al suceso, por breve que sea este tiempo, será benéfico para alertar a la población y de alguna manera sugerir que se tomen medidas precautorias para salvaguardar la salud de la comunidad, considerando que aún un solo día de anticipo podría prevenir afectaciones "tóxicas" considerables.

Estos modelos, tienen como característica una fácil implementación y requerimientos tecnológicos moderados, así como estructuras sencillas y de fácil entendimiento, lo que les confiere costos de operación mínimos; pudiendo en un futuro ser alimentados en forma continua y con mejoramientos constantes, empleados como herramienta por las instancias responsables en materia de salud, para hacer frente al crecimiento que experimentan las ciudades y por consiguiente posibles aumentos en los niveles de contaminación.

CAPÍTULO 7.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

Con la finalidad de cumplir con los objetivos planteados en este trabajo de tesis, se emplearon técnicas semi-emplíricas, para estimar la calidad de aire (concentración de ozono) en al Área Metropolitana de Monterrey (AMM).

Se generaron dos modelos distintos de predicción de concentraciones de ozono, siendo estos los siguientes:

1. Modelo pronóstico de Regresión Multivariable de tipo No Lineal (RNL)
2. Modelo pronóstico de Redes Neuronales Artificiales del tipo Retropropagación en multicapas (RNA)

Ambos modelos fueron calibrados con variables meteorológicas y químicas, a partir de datos otorgados por el SIMA y CNA para el periodo 1998 al 2001 en el AMM. Así mismo, la evaluación de su desempeño se realizó con datos otorgados por dichas instancias para los meses de Enero a Noviembre del año 2002. Para dicha evaluación se considero el porcentaje de aciertos que mostraron las estimaciones de ozono otorgadas por los modelos al compararlas con los valores de concentración de ozono observado en 3 diferentes niveles de calidad ambiental: **buena, moderada y mala.**

Tanto el modelo RNL como el RNA mostraron buenos desempeños en sus estimaciones sin presentar una diferencia significativa entre ambos. Sin embargo, también ambos tienen dificultades en estimar concentraciones de ozono por sí mismos, hecho por el cual, se aplicó un factor "incremento" a las estimaciones que el modelo genera, con ello sobreestimando la concentración de ozono y logrando estimar concentraciones elevadas de contaminante.

El modelo RNL constó de 9 variables independientes y 13 coeficientes de regresión, con un valor de $R^2 = 0.52247$, mostrando para el año 2002 un desempeño (porcentaje de acierto) global de:

1. **Calidad de aire EPA: 83.73% sin incremento y 74.09% con incremento.**
[<80 ppb 73.43%, 80-120 ppb 78.95% y >120 ppb 50.00%] con incremento.
2. **Calidad de aire NOM: 76.20% sin incremento y 69.57% con incremento.**
[<60 ppb 52.63%, 60-110 ppb 93.33% y >110 ppb 71.43%] con incremento.

El modelo RNA constó de 9 variables, con arreglos estructurales de 9x6x1 y 9x12x1, empleando en la capa oculta una función de transferencia logarítmica-sigmoidal y en la capa de salida una función de transferencia lineal. Los valores de R^2 para las diferentes redes variaron de 0.488 (R3) a 0.562 (R6), mostrando para el año 2002 un desempeño (porcentaje de acierto) global de:

1. **Calidad de aire EPA: 83.68% sin incremento y 72.81% con incremento**
[<80 ppb 71.11%, 80-120 ppb 84.21% y >120 ppb 25.00%] con incremento.
2. **Calidad de aire NOM: 77.95% sin incremento y 72.51% con incremento.**
[<60 ppb 59.26%, 60-110 ppb 91.85% y >110 ppb 57.14%] con incremento.

Estos desempeños fueron obtenidos empleando la red SR4 con estructura 9x6x1 y función de desempeño *MSEREG*.

Así, como porcentajes de acierto máximos en concentraciones de ozono fuera de norma obtenidos con la red SR8 con estructura 9x12x1 y función de desempeño *SSE*, mostrando para el año 2002 un desempeño global de:

- A. **Calidad de aire EPA: 82.78% sin incremento y 71.60% con incremento.**
[<80 ppb 71.37%, 80-120 ppb 80.70% y >120 ppb 25.00%] con incremento.
- B. **Calidad de aire NOM: 75.83% sin incremento y 68.88% con incremento.**
[<60 ppb 55.55%, 60-110 ppb 86.67% y >110 ppb 86.71%] con incremento.

En base a los resultados obtenidos por los modelos y las variables seleccionadas, se concluye que para el AMM las variables que tienen una mayor relevancia en la descripción de la formación de ozono por los modelos son:

temperatura máxima, factor RST, ozono anterior, velocidad del viento y óxidos de nitrógeno (NOx y NO₂); considerando sus relaciones físicas y químicas existentes. Aunado a esto se encuentran también las características propias de Monterrey N.L., estructura de la cuenca atmosférica y circulación de vientos.

Los modelos (RNL y RNA) presentados en este trabajo, tendrán la capacidad de estimar concentraciones máximas de ozono (ppb) en el AMM para el día de interés, requiriendo datos de variables meteorológicas máximas del día de interés (temperatura, velocidad del viento, humedad relativa, presión, radiación solar total y precipitación) y concentraciones (ppb) máximas de variables químicas del día anterior (ozono, NO₂ de 15 a 23 hrs., NOx de 15 a 23 hrs.), manejando tres niveles de calidad ambiental.

Los modelos generados, tienen como característica una fácil implementación y requerimientos tecnológicos moderados, así como estructuras sencillas y de fácil entendimiento, lo que les confiere costos de operación mínimos.

Estos modelos pueden tener como principal objetivo alertar a la población a escenarios no deseados de calidad de aire, tomando medidas precautorias para salvaguardar la salud de la comunidad.

Recomendaciones.

Una vez concluido este trabajo de tesis y analizando los aspectos más relevantes, se presentarán algunas recomendaciones, a fin de ser consideradas en trabajos futuros y/o implementación de los modelos presentados para operarlos en modo pronóstico, ya sea en la misma AMM o en otras ciudades donde se requiera.

Es importante hacer mención que la evaluación del desempeño de los modelos, se realizó evaluando el porcentaje de acierto de las estimaciones

CONCLUSIONES

respecto a los valores reales, pero siendo alimentadas las variables que requiere el modelo de datos medidos para el 2002. Es decir, la evaluación no consideró ver el desempeño de los modelos al ser alimentados por variables pronosticadas en lugar de mediciones reales, hecho que resultará interesante y demandante el contemplar, ya qué, uno de los puntos que se persigue es adelantarnos al suceso, por lo que se requerirá evaluar los modelos bajo este escenario.

Los modelos son perfectibles, no solo en su estructura o arreglo matemático, sino también, en las variables a considerar o bien emplear valores promedio en lugar de máximos; siendo para este estudio consideradas 9 variables (ej. humedad absoluta, vector de vientos, radiación medida con aparatos, entre otras). A fin de obtener desempeños adecuados en los modelos, será necesario alimentarlos preferentemente con la información requerida. En caso de omitir el valor de alguna variable, los modelos podrán ser empleados pero se esperaran posibles reducciones en su desempeño.

En el capítulo 6 de este trabajo, se mencionó que el posible paso limitante para la estructuración de los modelos recae en la base de datos de alimentación, por lo que, es indispensable contar con un sistema de control de calidad para el acceso de la información en el acomodo y valor necesarios para un buen desempeño.

Los modelos requirieron para su estructuración de lecturas diarias por 4 años, para otorgar los resultados expuestos en el trabajo. En caso de querer hacer una base de datos más extensa, a fin de tener una mayor precisión y desempeño, está se podrá considerar, sin olvidar que a mayor cantidad de datos a procesar, mayor serán los requerimientos computacionales y tiempo de operación que esto demande, por lo que se tendrá que tener cuidado en no caer en un modelo que para su aplicación requiera de gran cantidad de información que pueda resultar prohibitiva o bien de requerimientos computacionales que excedan a sistemas modestos y de fácil acceso.

Es importante señalar que los modelos que se obtuvieron son, en cierto modo, específicos para el AMM, tal que, en caso de querer emplear los modelos presentados en otras ciudades, se tendrán que hacer las consideraciones pertinentes como: vientos reinantes, estructura de la cuenca atmosférica, condiciones ambientales, sistemas de monitoreo, entre otras; a fin de tener buenos resultados en su aplicación.

En un futuro, se podrá pensar en modelos que tengan la capacidad de segregar sus estimaciones por horarios, haciendo con esto pronósticos más precisos y con menor margen de error.

La metodología empleada en este estudio para el desarrollo de los modelos presentados, podrá ser aplicada para generar modelos de predicción que permitan estimar concentraciones de otros contaminantes como PM_{10} ; considerando los principales mecanismos en la generación del contaminante y sus principales variables.

Por último, dado que estos modelos requieren de software específico para su operación, en nuestro caso SPSS y MATLAB, será necesario que la persona que desee operarlos, tenga conocimientos en el funcionamiento de dichos programas.

ANEXO I.

FUNCIONES DE REDES NEURONALES.

Tornado de Demuth *et. al.*, (2000). La descripción se deja en inglés para no modificar los comandos que emplea el software.

Función de Entrenamiento *TRAINLM*.

TRAINLM Levenberg-Marquardt backpropagation.

Syntax

```
[net,tr] = trainlm(net,Pd,TI,Ai,Q,TS,VV,TV)
info = trainlm(code)
```

Description

TRAINLM is a network training function that updates weight and bias values according to Levenberg-Marquardt optimization.

TRAINLM(NET,Pd,TI,Ai,Q,TS,VV,TV) takes these inputs,

NET - Neural network.

Pd - Delayed input vectors.

TI - Layer target vectors.

Ai - Initial input delay conditions.

Q - Batch size.

TS - Time steps.

VV - Either empty matrix [] or structure of validation vectors.

TV - Either empty matrix [] or structure of validation vectors.

and returns,

NET - Trained network.

TR - Training record of various values over each epoch:

TR.epoch - Epoch number.

TR.perf - Training performance.

TR.vperf - Validation performance.

TR.tperf - Test performance.

TR.mu - Adaptive mu value.

Training occurs according to the TRAINLM's training parameters shown here with their default values:

```
net.trainParam.epochs  100 Maximum number of epochs to train
net.trainParam.goal    0 Performance goal
net.trainParam.max_fail 5 Maximum validation failures
net.trainParam.mem_reduc 1 Factor to use for memory/speed trade off.
net.trainParam.min_grad 1e-10 Minimum performance gradient
net.trainParam.mu      0.001 Initial Mu
net.trainParam.mu_dec  0.1 Mu decrease factor
net.trainParam.mu_inc  10 Mu increase factor
net.trainParam.mu_max  1e10 Maximum Mu
net.trainParam.show    25 Epochs between displays (NaN for no displays)
net.trainParam.time    inf Maximum time to train in seconds
```

Dimensions for these variables are:

Pd - NoxNixTS cell array, each element P{i,j,ts} is a DijxQ matrix.

Tl - NlxTS cell array, each element P{i,ts} is a VixQ matrix.

Ai - NlxLD cell array, each element Ai{i,k} is an SixQ matrix.

Where

Ni = net.numInputs

NI = net.numLayers

LD = net.numLayerDelays

Ri = net.inputs{i}.size

Si = net.layers{i}.size

Vi = net.targets{j}.size

Dij = Ri * length(net.inputWeights{i,j}.delays)

If VV or TV is not [], it must be a structure of vectors:

VV.PD, TV.PD - Validation/test delayed inputs.

VV.TI, TV.TI - Validation/test layer targets.

VV.Ai, TV.Ai - Validation/test initial input conditions.

VV.Q, TV.Q - Validation/test batch size.

VV.TS, TV.TS - Validation/test time steps.

Validation vectors are used to stop training early if the network performance on the validation vectors fails to improve or remains the same for MAX_FAIL epochs in a row. Test vectors are used as a further check that the network is generalizing well, but do not have any effect on training.

TRAINLM(CODE) return useful information for each CODE string:

'pnames' - Names of training parameters.

'pdefaults' - Default training parameters.

Algorithm

TRAINLM can train any network as long as its weight, net input, and transfer functions have derivative functions.

Backpropagation is used to calculate the Jacobian jX of performance PERF with respect to the weight and bias variables X. Each variable is adjusted according to Levenberg-Marquardt,

$$jj = jX * jX$$

$$je = jX * E$$

$$dX = -(jj+I*mu) \setminus je$$

where E is all errors and I is the identity matrix.

The adaptive value MU is increased by MU_INC until the change above results in a reduced performance value. The change is then made to the network and mu is decreased by MU_DEC.

The parameter MEM_REDUCE indicates how to use memory and speed to calculate the Jacobian jX. If MEM_REDUCE is 1, then TRAINLM runs the fastest, but can require a lot of memory. Increasing MEM_REDUCE to 2, cuts some of the memory required by a factor of two, but slows TRAINLM somewhat. Higher values continue to decrease the amount of memory needed and increase training times.

Función de Aprendizaje **LEARNGDM**

LEARNGDM Gradient descent w/momentum weight/bias learning function.

Syntax

```
[dW,LS] = learngdm(W,P,Z,N,A,T,E,gW,gA,D,LP,LS)
[db,LS] = learngdm(b,ones(1,Q),Z,N,A,T,E,gW,gA,D,LP,LS)
info = learngdm(code)
```

Description

LEARNGDM is the gradient descent with momentum weight/bias learning function.

LEARNGDM(W,P,Z,N,A,T,E,gW,gA,D,LP,LS) takes several inputs,

W - SxR weight matrix (or Sx1 bias vector).
P - RxQ input vectors (or ones(1,Q)).
Z - SxQ weighted input vectors.
N - SxQ net input vectors.
A - SxQ output vectors.
T - SxQ layer target vectors.
E - SxQ layer error vectors.
gW - SxR gradient with respect to performance.
gA - SxQ output gradient with respect to performance.
D - SxS neuron distances.
LP - Learning parameters, none, LP = [].
LS - Learning state, initially should be = [].

and returns,

dW - SxR weight (or bias) change matrix.
LS - New learning state.

Learning occurs according to LEARNGDM's learning parameters, shown here with their default values.

LP.lr - 0.01 - Learning rate
LP.mc - 0.9 - Momentum constant

LEARNGDM(CODE) returns useful information for each CODE string:

'pnames' - Returns names of learning parameters.
'pdefaults' - Returns default learning parameters.
'needg' - Returns 1 if this function uses gW or gA.

Algorithm

LEARNGDM calculates the weight change dW for a given neuron from the neuron's input P and error E, the weight (or bias) learning rate LR, and momentum constant MC, according to gradient descent with momentum:

$$dW = mc*dW_{prev} + (1-mc)*lr*gW$$

The previous weight change dW_{prev} is stored and read from the learning state LS.

Función de Desempeño *MSE*

MSE Mean squared error performance function.

Syntax

```
perf = mse(e,x,pp)
perf = mse(e,net,pp)
info = mse(code)
```

Description

MSE is a network performance function. It measures the network's performance according to the mean of squared errors.

MSE(E,X,PP) takes from one to three arguments,
E - Matrix or cell array of error vector(s).
X - Vector of all weight and bias values (ignored).
PP - Performance parameters (ignored).

and returns the mean squared error.

MSE(E,NET,PP) can take an alternate argument to X,
NET - Neural network from which X can be obtained (ignored).

MSE(CODE) returns useful information for each CODE string:

'deriv' - Returns name of derivative function.
'name' - Returns full name.
'pnames' - Returns names of training parameters.
'pdefaults' - Returns default training parameters.

Función de Desempeño *MSEREG*

MSEREG Mean squared error with regularization performance function.

Syntax

```
perf = msereg(e,x,pp)
perf = msereg(e,net)
info = msereg(code)
```

Description

MSEREG is a network performance function. It measures network performance as the weight sum of two factors:
the mean squared error and the mean squared weights and biases.

MSEREG(E,X,PP) takes from three arguments,
E - Matrix or cell array of error vector(s).
X - Vector of all weight and bias values.
PP - Performance parameter.

where PP defines one performance parameter,

PP.ratio - Relative importance of errors vs. weight and bias values.

and returns the sum of mean squared errors (times PP.ratio) with the mean squared weight and bias values (times 1-PP.ratio).

The errors E can be given in cell array form,

E - NtxTS cell array, each element E{i,ts} is a VixQ matrix or [].

or as a matrix,
E - (sum of Vi)xQ matrix
where:
Nt = net.numTargets
TS = number of time steps
Q = batch size
Vi = net.targets{i}.size

MSEREG(E,NET) takes an alternate argument to X and PP,
NET - Neural network from which X and PP can be obtained.

MSEREG(CODE) returns useful information for each CODE string:
'deriv' - Returns name of derivative function.
'name' - Returns full name.
'pnames' - Returns names of training parameters.
'pdefaults' - Returns default training parameters.

Función de Desempeño SSE

SSE Sum squared error performance function.

Syntax

```
perf = sse(e,x,pp)
perf = sse(e,net,pp)
info = sse(code)
```

Description

SSE is a network performance function. It measures performance according to the sum of squared errors.

SSE(E,X,PP) takes from one to three arguments,
E - Matrix or cell array of error vector(s).
X - Vector of all weight and bias values (ignored).
PP - Performance parameters (ignored).

and returns the sum squared error.

SSE(E,NET,PP) can take an alternate argument to X,
NET - Neural network from which X can be obtained (ignored).

SSE(CODE) returns useful information for each CODE string:
'deriv' - Returns name of derivative function.
'name' - Returns full name.
'pnames' - Returns names of training parameters.
'pdefaults' - Returns default training parameters.

Función de Transferencia LOGSIG

LOGSIG Logarithmic sigmoid transfer function.

Syntax

```
A = logsig(N)
info = logsig(code)
```

Description

LOGSIG is a transfer function. Transfer functions calculate a layer's output from its net input.

LOGSIG(N) takes one input,
N - SxQ matrix of net input (column) vectors.
and returns each element of N squashed between 0 and 1.

LOGSIG(CODE) returns useful information for each CODE string:
'deriv' - Returns name of derivative function.
'name' - Returns full name.
'output' - Returns output range.
'active' - Returns active input range.

Algorithm

$$\text{logsig}(n) = 1 / (1 + \exp(-n))$$

Función de Transferencia *PURELIN*

PURELIN Linear transfer function.

Syntax

A = purelin(N)
info = purelin(code)

Description

PURELIN is a transfer function. Transfer functions calculate a layer's output from its net input.

PURELIN(N) takes one input,
N - SxQ matrix of net input (column) vectors.
and returns N.

PURELIN(CODE) returns useful information for each CODE string:
'deriv' - Returns name of derivative function.
'name' - Returns full name.
'output' - Returns output range.
'active' - Returns active input range.

Algorithm

$$\text{purelin}(n) = n$$

ANEXO II.

PROGRAMAS DE REDES NEURONALES.

Red Neuronal R3

Estructura 9x6x1, función de desempeño *MSE*.

```
architecture:
  numInputs: 1
  numLayers: 2
  biasConnect: [1; 1]
  inputConnect: [1; 0]
  layerConnect: [0 0; 1 0]
  outputConnect: [0 1]
  targetConnect: [0 1]

  numOutputs: 1 (read-only)
  numTargets: 1 (read-only)
  numInputDelays: 0 (read-only)
  numLayerDelays: 0 (read-only)

  subobject structures:
    inputs: {1x1 cell} of inputs
    layers: {2x1 cell} of layers
    outputs: {1x2 cell} containing 1 output
    targets: {1x2 cell} containing 1 target
    biases: {2x1 cell} containing 2 biases
    inputWeights: {2x1 cell} containing 1 input
    weight
    layerWeights: {2x2 cell} containing 1 layer
    weight

functions:
  adaptFcn: 'trains'
  initFcn: 'initlay'
  performFcn: 'mse'
  trainFcn: 'trainlm'

parameters:
  adaptParam: .passes
  initParam: (none)
  performParam: (none)
  trainParam: .epochs, .goal, .max_fail,
  .mem_reduc,
  .min_grad, .mu, .mu_dec, .mu_inc,
  .mu_max, .show, .time

weight and bias values:
  IW: {2x1 cell} containing 1 input weight
  matrix
  LW: {2x2 cell} containing 1 layer weight
  matrix
  b: {2x1 cell} containing 2 bias vectors

other:   userdata: (user stuff)
```

MATRIZ DE PESOS EN LA PRIMER CAPA (Red R3)

```
[-70.7199 -110.784 -179.5169 -49.6172 15.9562 16.4373 -140.2363 56.4718 -40.2101;
45.7092 -19.3685 -16.8829 11.519 0.60721 84.597 -2.2972 1.6686 2.1018;
-99.6346 171.279 19.7594 39.6843 -3.3734 51.241 33.1853 -25.5339 2.3169;
0.29665 -0.31143 0.11701 5.2378 0.051979 -25.8954 -0.034623 -0.19005 -0.076491;
0.21936 -0.1632 0.02254 -0.009442 -0.022643 2.8914 0.011906 0.0066826 -0.00025892;
78.7159 -66.8398 -33.4722 37.8784 2.8009 55.9452 3.8444 23.0642 -15.4097]
```

VECTOR DE PESOS EN LA SEGUNDA CAPA (Red R3)

```
[-1.4354 5.9406 2.6222 -15.3468 58.3069 8.4531]
```

VECTOR ADYACENTE EN LA PRIMER CAPA (Red R3)

```
[24.544;
33.3776;
-187.8163;
-31.938;
12.4355;
14.8025]
```

ECALAR ADYACENTE EN LA SEGUNDA CAPA (Red R3)

```
[24.6684]
```

Red Neuronal R4
Estructura 9x6x1, función de desempeño *MSEREG*.

```

architecture:
  numInputs: 1
  numLayers: 2
  biasConnect: [1; 1]
  inputConnect: [1; 0]
  layerConnect: [0 0; 1 0]
  outputConnect: [0 1]
  targetConnect: [0 1]

  numOutputs: 1 (read-only)
  numTargets: 1 (read-only)
  numInputDelays: 0 (read-only)
  numLayerDelays: 0 (read-only)

subobject structures:
  inputs: {1x1 cell} of inputs
  layers: {2x1 cell} of layers
  outputs: {1x2 cell} containing 1 output
  targets: {1x2 cell} containing 1 target
  biases: {2x1 cell} containing 2 biases
  inputWeights: {2x1 cell} containing 1 input
weight
  layerWeights: {2x2 cell} containing 1 layer
weight

functions:
  adaptFcn: 'trains'
  initFcn: 'initlay'
  performFcn: 'msereg'
  trainFcn: 'trainlm'

parameters:
  adaptParam: .passes
  initParam: (none)
  performParam: .ratio
  trainParam: .epochs, .goal, .max_fail,
.mem_reduc,
                .min_grad, .mu, .mu_dec,
.mu_inc,
                .mu_max, .show, .time

weight and bias values:
  IW: {2x1 cell} containing 1 input
weight matrix
  LW: {2x2 cell} containing 1 layer
weight matrix
  b: {2x1 cell} containing 2 bias
vectors

other:  userdata: (user stuff)

```

MATRIZ DE PESOS EN LA PRIMER CAPA (Red R4)

```

[-8.8258 14.7689 -59.0921 24.4805 3.2353 3.4552 -53.2784 -56.0381 25.3984;
69.6336 -135.3158 24.537 -34.6003 -1.3155 -50.7247 5.9248 10.4844 -9.4508;
12.4964 -37.8785 15.3377 -14.4239 -0.79658 -17.5915 0.53711 -7.9292 -0.92479;
-0.16212 0.074653 -0.014443 0.01185 0.025333 -4.4737 -0.0065339 -0.021817 0.0015638;
24.0966 -145.4812 -107.4767 65.9393 15.8544 5.8708 -9.0125 11.5697 -14.7665;
-1.5291 -1.9657 -0.8468 0.68254 0.10336 49.6376 0.59324 0.43577 -0.20872]

```

VECTOR DE PESOS EN LA SEGUNDA CAPA (Red R4)

```

[-8.9553 -0.040595 1.8775 -70.2886 -1.1217 9.6006]

```

**VECTOR ADYACENTE
EN LA PRIMER CAPA
(Red R4)**

```

[38.3145;
-125.0478;
6.2866;
-14.8153;
-23.6599;
-35.3784]

```

**ECALAR ADYACENTE
EN LA SEGUNDA CAPA
(Red R4)**

```

[86.1982]

```

Red Neuronal R5

Estructura 9x6x1, función de desempeño SSE.

```

architecture:
  numInputs: 1
  numLayers: 2
  biasConnect: [1; 1]
  inputConnect: [1; 0]
  layerConnect: [0 0; 1 0]
  outputConnect: [0 1]
  targetConnect: [0 1]

  numOutputs: 1 (read-only)
  numTargets: 1 (read-only)
  numInputDelays: 0 (read-only)
  numLayerDelays: 0 (read-only)

subobject structures:
  inputs: {1x1 cell} of inputs
  layers: {2x1 cell} of layers
  outputs: {1x2 cell} containing 1 output
  targets: {1x2 cell} containing 1 target
  biases: {2x1 cell} containing 2 biases
  inputWeights: {2x1 cell} containing 1 input
weight
  layerWeights: {2x2 cell} containing 1 layer
weight

functions:
  adaptFcn: 'trains'
  initFcn: 'initlay'
  performFcn: 'sse'
  trainFcn: 'trainlm'

parameters:
  adaptParam: .passes
  initParam: (none)
  performParam: (none)
  trainParam: .epochs, .goal, .max_fail,
.mem_reduc,
                .min_grad, .mu, .mu_dec,
.mu_inc,
                .mu_max, .show, .time

weight and bias values:
  IW: {2x1 cell} containing 1 input
weight matrix
  LW: {2x2 cell} containing 1 layer
weight matrix
  b: {2x1 cell} containing 2 bias
vectors

other:  userdata: (user stuff)

```

MATRIZ DE PESOS EN LA PRIMER CAPA (Red R5)

```

[-60.027 -27.9724 -49.7708 1.1051 -0.48475 10.8228 77.3924 -20.2389 14.8242;
-47.4175 50.7944 -13.5476 -57.6662 2.4346 -4.1078 -6.1134 15.5757 -13.7232;
-54.0816 -36.0414 -29.3027 -63.2899 0.58016 -8.4875 -6.8487 40.9047 30.9567;
-19.3163 -64.7313 28.5057 -45.1326 0.59065 -3.272 16.7204 -0.37074 -9.7014;
0.11033 -0.081752 0.00062688 0.0012934 -0.01544 4.5133 0.013475 0.030788 -0.0039372;
-41.0632 19.2609 2.9519 35.7252 -0.56166 41.6916 5.8194 13.8622 -0.47201]

```

VECTOR DE PESOS EN LA SEGUNDA CAPA (Red R5)

```

[-2.0137 -2.2326 -5.5244 3.5033 78.7365 -5.8796]

```

VECTOR ADYACENTE EN LA PRIMER CAPA (Red R5)

```

[-91.4287;
-113.2725;
-1.2853;
-23.498;
7.4916;
17.8903]

```

ECALAR ADYACENTE EN LA SEGUNDA CAPA (Red R5)

```

[16.4827]

```

Red Neuronal R6

Estructura 9x12x1, función de desempeño *MSE*.

```
architecture:
  numInputs: 1
  numLayers: 2
  biasConnect: [1; 1]
  inputConnect: [1; 0]
  layerConnect: [0 0; 1 0]
  outputConnect: [0 1]
  targetConnect: [0 1]

  numOutputs: 1 (read-only)
  numTargets: 1 (read-only)
  numInputDelays: 0 (read-only)
  numLayerDelays: 0 (read-only)

subobject structures:
  inputs: {1x1 cell} of inputs
  layers: {2x1 cell} of layers
  outputs: {1x2 cell} containing 1 output
  targets: {1x2 cell} containing 1 target
  biases: {2x1 cell} containing 2 biases
  inputWeights: {2x1 cell} containing 1 input
weight
  layerWeights: {2x2 cell} containing 1 layer
weight

functions:
  adaptFcn: 'trains'
  initFcn: 'initlay'
  performFcn: 'mse'
  trainFcn: 'trainlm'

parameters:
  adaptParam: .passes
  initParam: (none)
  performParam: (none)
  trainParam: .epochs, .goal, .max_fail,
.mem_reduc,
.min_grad, .mu, .mu_dec, .mu_inc,
.mu_max, .show, .time

weight and bias values:
  IW: {2x1 cell} containing 1 input weight
matrix
  LW: {2x2 cell} containing 1 layer weight
matrix
  b: {2x1 cell} containing 2 bias vectors

other: userdata: (user stuff)
```

MATRIZ DE PESOS EN LA PRIMER CAPA (Red R6)

```
[-39.2583 -23.7438 -54.575 -55.5834 6.0126 -204.6706 12.2354 -20.9527 22.7095;
-10.0077 -2.7919 -9.7249 8.207 0.25007 -3.3217 4.5774 -5.4305 -5.1298;
0.96579 36.31 41.9987 51.5513 -4.8697 91.6319 16.1327 -16.8132 33.529;
-71.8793 20.8188 25.8375 -102.26 0.40929 -56.5111 -5.5019 -12.3633 -9.783;
0.1643 -0.12958 0.036545 -0.0065947 -0.032871 5.9043 0.0053843 0.02482 -0.0034218;
-117.1995 -3.5666 34.223 -28.9918 -2.3386 80.4243 23.7872 33.7182 -7.5209;
12.2143 5.2438 12.314 23.0505 7.5784 -2.3228 14.5667 -14.1455 -41.5946;
-10.0024 43.4429 1.1342 -88.1254 -2.0292 -224.6414 48.5416 21.2786 -7.3532;
-54.1746 49.8808 -5.2068 18.1785 -0.033826 183.9684 15.0556 2.8813 -1.9507;
-15.9586 41.2823 49.2505 -76.1739 -4.4822 -51.6601 4.6846 -60.5445 20.5396;
81.5629 -56.4953 -63.7886 -45.7509 4.9625 -122.3093 -1.3322 -9.6073 11.5142;
-67.1844 -24.144 -35.4852 -35.3632 4.3297 8.312 66.7259 -47.4819 11.1353]
```

VECTOR DE PESOS EN LA SEGUNDA CAPA (Red R6)

```
[2.7324 -1.2234 2.7207 -2.1166 61.1094 -4.5308 2.0718 8.2837 4.9957 -4.7216 3.2989 1.8303]
```

VECTOR ADYACENTE EN LA PRIMER CAPA (Red R6)

```
[63.2307;
53.7402;
68.1781;
-41.5957;
19.4524;
50.3526;
-40.9047;
-32.1688;
26.258;
-50.4641;
-103.9476;
125.8924]
```

ECALAR ADYACENTE EN LA SEGUNDA CAPA (Red R6)

```
[12.2351]
```

Red Neuronal R7

Estructura 9x12x1, función de desempeño *MSEREG*.

```
architecture:
  numInputs: 1
  numLayers: 2
  biasConnect: [1; 1]
  inputConnect: [1; 0]
  layerConnect: [0 0; 1 0]
  outputConnect: [0 1]
  targetConnect: [0 1]

  numOutputs: 1 (read-only)
  numTargets: 1 (read-only)
  numInputDelays: 0 (read-only)
  numLayerDelays: 0 (read-only)

  subobject structures:
    inputs: {1x1 cell} of inputs
    layers: {2x1 cell} of layers
    outputs: {1x2 cell} containing 1 output
    targets: {1x2 cell} containing 1 target
    biases: {2x1 cell} containing 2 biases
    inputWeights: {2x1 cell} containing 1 input
weight
    layerWeights: {2x2 cell} containing 1 layer
weight

  functions:
    adaptFcn: 'trains'
    initFcn: 'initlay'
    performFcn: 'msereg'
    trainFcn: 'trainlm'

  parameters:
    adaptParam: .passes
    initParam: (none)
    performParam: .ratio
    trainParam: .epochs, .goal, .max_fail,
.mem_reduc,
    .min_grad, .mu, .mu_dec, .mu_inc,
    .mu_max, .show, .time

  weight and bias values:
    IW: {2x1 cell} containing 1 input weight
matrix
    LW: {2x2 cell} containing 1 layer weight
matrix
    b: {2x1 cell} containing 2 bias vectors

  other:    userdata: (user stuff)
```

MATRIZ DE PESOS EN LA PRIMER CAPA (Red R7)

```
[63.1415 13.8813 -40.3471 27.3056 6.7447 2.1625 -1.8787 -58.1906 13.9844;
-0.043254 -0.30999 20.0469 -14.7099 -3.4236 -44.0087 22.434 25.2753 1.9713;
35.3 -3.3507 -29.959 -0.57346 3.3222 4.8205 12.1709 -3.1968 -14.8706;
2.7798 40.5254 7.6267 55.084 -1.4953 44.6283 -2.6903 7.5986 -0.96493;
16.291 1.8831 10.2373 -7.0889 -1.6183 -15.8613 0.078144 14.6619 -4.3792;
-4.7862 -3.2822 29.3149 -5.9918 14.84 -2.7176 -1.8844 -5.3927 -25.9358;
0.16577 -0.10774 0.0088448 0.0081898 -0.018051 4.5443 0.010195 0.0064141 0.00082819;
10.2907 -55.2043 -8.976 24.2653 1.5231 -41.5799 0.50868 0.08084 -3.0833;
0.25478 -0.0091406 -0.76877 -0.12718 0.0592 39.9845 0.03082 1.9677 -0.25844;
15.2331 46.4334 32.2435 -1.8678 -5.8337 1.3831 9.3139 -4.0015 17.3995;
7.9042 -12.2294 -0.8685 9.902 0.3993 -3.3139 -1.7078 -6.6265 -0.0033545;
-13.7564 13.2415 0.16868 -3.2465 -0.2627 -6.4314 0.1351 -1.831 0.68062]
```

VECTOR DE PESOS EN LA SEGUNDA CAPA (Red R7)

```
[19.9409 0.48796 9.4738 -5.8144 5.3371 -8.2089 63.9378 -3.7667 9.3217 0.62463 1.3537 5.6735]
```

VECTOR ADYACENTE EN LA PRIMER CAPA (Red R7)

```
[-67.581;
-115.6744;
8.7513;
-67.2102;
-5.1158;
44.4458;
8.6589;
37.0534;
-77.0836;
0.54648;
81.0804;
-41.0677]
```

ECALAR ADYACENTE EN LA SEGUNDA CAPA (Red R7)

```
[0.68055]
```


Red Neuronal R8

Estructura 9x12x1, función de desempeño SSE.

architecture:

numInputs: 1
numLayers: 2
biasConnect: [1; 1]
inputConnect: [1; 0]
layerConnect: [0 0; 1 0]
outputConnect: [0 1]
targetConnect: [0 1]

numOutputs: 1 (read-only)
numTargets: 1 (read-only)
numInputDelays: 0 (read-only)
numLayerDelays: 0 (read-only)

subobject structures:

inputs: {1x1 cell} of inputs
layers: {2x1 cell} of layers
outputs: {1x2 cell} containing 1 output
targets: {1x2 cell} containing 1 target
biases: {2x1 cell} containing 2 biases
inputWeights: {2x1 cell} containing 1 input weight
layerWeights: {2x2 cell} containing 1 layer weight

functions:

adaptFcn: 'trains'
initFcn: 'initlay'
performFcn: 'sse'
trainFcn: 'trainlm'

parameters:

adaptParam: .passes
initParam: (none)
performParam: (none)
trainParam: .epochs, .goal, .max_fail,
.mem_reduc,
.min_grad, .mu, .mu_dec, .mu_inc,
.mu_max, .show, .time

weight and bias values:

IW: {2x1 cell} containing 1 input weight
matrix
LW: {2x2 cell} containing 1 layer weight
matrix
b: {2x1 cell} containing 2 bias vectors
other: userdata: (user stuff)

MATRIZ DE PESOS EN LA PRIMERA CAPA (Red R8)

[88.1981 -2.2027 -35.6122 13.5682 -5.194 4.0428 -52.4072 40.75 -7.5797;
58.5715 17.7123 -30.0015 -16.3259 -3.9324 -4.8302 24.8165 21.0665 17.2792;
66.8978 -70.9777 -18.099 -48.2603 -9.3824 16.0114 76.6439 20.507 -8.0675;
3.9679 0.30363 -1.5226 9.3051 -0.33604 208.2949 -0.56912 -1.3278 0.40465;
8.0247 -8.9482 -30.7431 100.3472 5.5786 40.9381 12.8917 -16.9538 4.1186;
-91.5654 32.8322 -26.0754 -6.2502 0.51267 0.60084 26.8506 37.6269 10.3009;
-20.0404 111.7965 11.2108 15.4883 11.6103 -1.4352 -78.4632 -1.1945 26.1843;
-1.1716 83.0453 5.9189 9.8065 -2.3984 18.037 11.0199 9.4572 1.3642;
46.3383 29.3869 4.5358 13.5182 -3.0305 -64.7965 -13.4327 5.9023 -9.9094;
0.11774 -0.075908 -0.0093711 0.0080166 -0.017701 3.5854 0.0072726 0.010855 0.0013544;
-14.9122 -29.9185 20.4649 59.4123 1.2162 -41.0256 -19.7005 -5.5809 -13.7238;
-1.8679 4.8093 -26.3447 5.4309 3.8339 -5.3164 -5.2334 2.1875 -0.90998]

VECTOR DE PESOS EN LA SEGUNDA CAPA (Red R8)

[9.6884 -11.9264 7.0852 -10.2475 -2.833 -0.71856 2.5793 8.5906 -1.2522 98.7375 0.92258 3.4029]

VECTOR ADYACENTE EN LA PRIMERA CAPA (Red R8)

[65.3944;
-19.7448;
-18.0319;
160.163;
28.28;
79.3033;
-72.6756;
-2.7356;
-127.7573;
11.3966;
-60.801;
12.1123]

ECALAR ADYACENTE EN LA SEGUNDA CAPA (Red R8)

[5.1537]

BIBLIOGRAFÍA

- Artola, A.E. (2001) Ozono Troposférico.
<http://www1.ceit.es/Asignaturas/Ecología/NotTecnicas/OZONO.htm>
- Beaton, S.P.; Bishop, G.A.; Stedman, D.H. (1992) Emission characteristics of Mexico City Vehicles. *J. Air & Waste Manage. Assoc.* **42**:1424-1429.
- Bishop, G.A.; Stedman, D.H.; De la Garza Castro, J.; Dávalos, F.J. (1997) On-road remote sensing of vehicle emissions in Mexico. *Environ. Sci. Technol.* **31**:3505-3510.
- Blake, D.R.; Rowland, F.S. (1995) Urban leakage of liquefied petroleum gas and its impact on Mexico City Air Quality. *Science.* **269**:953-956.
- Bravo, H.A.; Torres, R.J. (2000) The usefulness of air quality monitoring and air quality impact studies before the introduction of reformulated gasolines in developing countries. Mexico City, a real case study. *Atmospheric Environment.* **34**:499-506.
- Cobourn, W.G.; Dolcine, L.; Frech, M.; Hubbard, M.C. (2000) A comparison of nonlinear regression and neural network models for ground-level ozone forecasting. *J. Air & Waste Manage. Assoc.* **50**:1999-2009.
- Comrie, A.C. (1997) Comparing neural networks and regression models for ozone forecasting. *J. Air & Waste Manage. Assoc.* **47**:653-663.
- Chang, T.Y.; Rudy, S.J. (1993) Ozone-precursor relationships: a modeling study of semiempirical relationships. *Environmental Science & Technology.* **27**:2213-2219.
- Demuth, H.; Beale, M. (2000) Neural network toolbox, for use with Matlab. User's guide version 4. 6th Ed. *The Mathworks, Inc.*
- Gardner, M.W.; Dorling, S.R. (1998) Artificial neural networks (the multilayer perceptron) –A review of applications in the Atmospheric Sciences. *Atmospheric Environment.* **32**:2627-2636.
- Hubbard, M.; Cobourn, W.G. (1998) Development of a regression model to forecast ground-level ozone concentration in Louisville, KY. *Atmospheric Environment.* **32**:2637-2647.
- Instituto Nacional de Ecología (INE). (1998) Segundo Informe Sobre la Calidad del Aire en Ciudades Mexicanas 1997. Litografía Helio: México, D.F.

- Instituto Nacional de Ecología (INE). (1999) Tercer Informe Sobre la Calidad del Aire en Ciudades Mexicanas 1998. Litografía Helio: México, D.F.
- Liu, P.W.; Johnson, R. (2002) Forecasting Peak Daily Ozone Levels-I. A Regression with Time Series Errors Model Having a Principal Component Trigger to Fit 1991 Ozone Levels. *J. Air & Waste Manage. Assoc.* **52**:1064-1074.
- MATLAB for Windows. Version 6.0.0.88. Release 12. (2000) *The Mathworks, Inc.*
- McRae, G.J.; Goodin, W.R.; Seinfeld, J.H. (1981) Development of a Second Generation Mathematical Model for Urban Air Pollution: I. Model Formulation. *Atmospheric environment.* **16**: 679-696.
- Nebel, B. J.; Wright, R. T. (2000) *Environmental Science.* 7th Ed. *Prentice Hall.*
- Pun, B.K.; Louis, J.-F.; Pai, P.; Seigneur, C.; Altshuler, S.; Franco, G. (2000) Ozone formation in California's San Joaquin Valley: A critical assessment of modeling and data needs. *J. Air & Waste Manage. Assoc.* **50**:961-971.
- Robenson, S.M.; Steyn, D.G. (1990) Evaluation and comparison of statistical forecast models for daily maximum ozone concentrations. *Atmospheric environment.* **24B**: 303-312.
- Roth, P.M. (1999) A qualitative approach to evaluating the anticipated reliability of a photochemical air quality simulation model for a selected application. *J. Air & Waste Manage. Assoc.* **49**:1050-1059.
- Russell, A.; Dennis, R. (2000) NARSTO critical review of photochemical models and modeling. *Atmospheric Environment.* **34**:2283-2324.
- Schifter, I.; Díaz, L.; López-Salinas, E.; Rodríguez, R.; Avalos, S.; Guerrero, V. (2000a) An evaluation of the LPG vehicles program in the Metropolitan Area of Mexico City. *J. Air & Waste Manage. Assoc.* **50**:301-309.
- Schifter, I.; Magdaleno, M.; Díaz, L.; Melgarejo, L.A.; Barrera, A.; Kruger, B.; Arriaga, J.L.; López-Salinas, E. (2000b) Contribution of LPG-derived emissions to air pollution in the Metropolitan Area of Guadalajara City. *J. Air & Waste Manage. Assoc.* **50**:1857-1864.
- Sistema Integral de Monitoreo Ambiental (SIMA).
<http://www.ni.gov.mx/dep/sduop/sima/sima.htm>

- Seinfeld, J.H.; Pandis, S.N. (1998) Atmospheric chemistry and physics, from air pollution to climate change. *John Wiley & Sons, Inc.*
- Soja, G.; Soja, A.-M. (1999) Ozone indices based on simple meteorological parameters: potentials and limitations of regression and neural networks models. *Atmospheric Environment*. **33**:4299-4307.
- SPSS for Windows. Release 10.0.1. (1999) Standard Version.
- Thompson, M.L.; Reynolds, J.; Cox, L.H.; Guttorp, P.; Sampson, P.D. (2001) A review of statistical methods for the meteorological adjustment of tropospheric ozone. *Atmospheric Environment*. **35**:617-630.
- Wark, K.; Warner C. F. (2000) Contaminación del aire, origen y control. *Limusa*.

