



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE GEOFÍSICA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA

HERRAMIENTAS MATEMÁTICAS PARA EL ANÁLISIS DE SISTEMAS DE OBSERVACIÓN ATMOSFÉRICA

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGÍSTER EN METEOROLOGÍA Y
CLIMATOLOGÍA
MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO

ADOLFO RENÉ HENRÍQUEZ SAA

PROFESORA GUÍA:
LAURA GALLARDO KLENNER

PROFESOR CO-GUÍA:
AXEL OSSES ALVARADO

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
JUAN QUINTANA ARENA
ROBERTO RONDANELLI ROJAS

SANTIAGO DE CHILE
2014

RESUMEN DE TESIS
PARA OPTAR AL GRADO DE
MAGÍSTER EN METEOROLOGÍA Y CLIMATOLOGÍA
Y PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO
POR: ADOLFO RENÉ HENRÍQUEZ SAA
FECHA: 5/6/2014
PROF. GUÍA: LAURA GALLARDO K.
PROF. CO-GUÍA: AXEL OSSES A.

HERRAMIENTAS MATEMÁTICAS PARA EL ANÁLISIS DE SISTEMAS DE OBSERVACIÓN ATMOSFÉRICA

La Teoría de la Observación y Asimilación permite estudiar diversos Sistemas de Observación Atmosférica, entregando un marco matemático para abordar problemas de incompletitud e incertidumbre de las observaciones mediante la introducción de conceptos de asimilación, error, precisión, calidad y optimalidad de éstas. Cuando se cuenta con un modelo del fenómeno observado, es posible utilizar esta teoría -desde una perspectiva variacional- para mejorar estimaciones o determinar parámetros propios de éste. Por el contrario, si no se cuenta con un modelo, esta teoría permite -desde una perspectiva estadística- descubrir en las observaciones estructuras internas a partir de la cuales proponer mecanismos descriptivos.

La primera parte de esta tesis aborda el sistema de observación correspondiente a la actual red de monitoreo de la calidad del aire de Santiago de Chile. Para ello se cuenta con datos provenientes de un modelo de dispersión de CO para la cuenca de Santiago durante el verano del año 2005. Primero se introducen los conceptos básicos de la teoría de la observación necesarios para definir indicadores de la calidad de las observaciones. A partir de éstos se proponen -y aplican a la red de estudio- metodologías para extensión, reducción, agrupamiento y optimalidad de redes de monitoreo. En particular, se determinan los rasgos que debería tener una red de monitoreo en la cuenca de Santiago para ser óptima respecto de la cantidad de información que ésta provee.

La segunda parte de esta tesis consiste en un estudio de la estructura vertical de ozono troposférico sobre Rapa Nui. Para ello se cuenta con datos provenientes de 210 ozonosondas entre los años 1994 y 2010. La aplicación de un análisis estadístico clásico a los datos y la revisión de campos meteorológicos provenientes de los reanálisis NCEP/NCAR, permiten proponer mecanismos dinámicos para explicar ciertos rasgos de la estructura de ozono en la región de estudio. Posteriormente, la aplicación de métodos de clustering basados en asimilación estadística de datos -Self Organizing Maps-, permite corroborar las hipótesis propuestas por el análisis clásico. En particular, se afirma que la distribución del ozono en la tropósfera alta está caracterizada por los mecanismos de intercambio tróposfera-estratósfera asociados la presencia del Jet Subtropical sobre la región de estudio.

Tabla de Contenido

1. Introducción y Objetivos	1
1.1. Introducción a la primera parte	2
1.1.1. Aspectos meteorológicos de la contaminación atmosférica en Santiago	2
1.1.2. Evolución de la red de monitoreo de calidad del aire MACAM	4
1.2. Objetivos de la primera parte	6
1.2.1. Objetivos principales de la primera parte	6
1.2.2. Objetivos secundarios de la primera parte	6
1.3. Introducción a la segunda parte	7
1.4. Objetivos de la segunda parte	8
1.4.1. Objetivos principales de la segunda parte	8
1.4.2. Objetivos secundarios de la segunda parte	8
I Diseño Óptimo de Redes de Monitoreo de Calidad del Aire	9
2. Introducción a la Teoría de la Observación	10
2.1. Definiciones preliminares	10
2.2. Estimador BLUE (Best Linear Unbiased Estimator)	11
2.2.1. Construcción del estimador BLUE	11
2.2.2. El estimador BLUE en términos de la descomposición en valores singulares de H	12
2.3. Indicadores de la Calidad del Operador de Observación	14
2.3.1. Precisión, Cantidad de Información y Recuperabilidad	14
2.3.2. Grados de libertad	16
2.3.3. Relaciones entre Precisión, Incremento de la Cantidad de Informa- ción y Grados de Libertad	22
3. Aplicación a redes de monitoreo de calidad del aire	26
3.1. Construcción del operador de observación para el caso de una red de mo- nitoreo de calidad del aire	26
3.2. Estructura y cálculo del operador de observación linealizado	27
3.3. Criterios de diseño de redes de monitoreo ambiental	30
3.3.1. Criterios de diseño basados en los conjuntos de emisión y/o obser- vación	30
3.3.2. Criterios de extensión y reducción de redes de monitoreo ambiental	32
3.3.3. Criterios de diseño óptimo de una red de monitoreo de calidad del aire	33

3.3.4. Relajación del problema de red óptima para el caso del incremento de la cantidad de información	36
4. Resultados	39
4.1. Configuración general	39
4.1.1. El modelo meteorológico MM5 y el modelo de dispersión Polyphemus	39
4.1.2. Dominio del modelo de dispersión	39
4.2. Estructura de las matrices \hat{H} , B y C	40
4.2.1. Estructura de la matriz de sensibilidad \hat{H}	40
4.2.2. Estructura de las matrices de varianza B y C	41
4.2.3. Ponderación de las emisiones en base a la densidad poblacional	42
4.2.4. Indicadores de la calidad de una red utilizados	43
4.3. Resultados de la extensión y reducción de la red MACAM-2009	44
4.3.1. Extensión	44
4.3.2. Reducción	50
4.4. Resultados del diseño óptimo de una red	61
4.4.1. Revisión individual de las redes óptimas	63
4.4.2. Comparación entre redes óptimas	73
5. Conclusiones de la primera parte	82
5.1. Resumen de resultados obtenidos	82
5.2. Proyecciones del trabajo	84
II Análisis de Ozonosondas en Rapa Nui	85
6. Descripción Meteorológica de la Estación de Monitoreo	86
7. Descripción de los Datos	92
8. Metodología	94
9. Resultados	98
9.1. Climatología tradicional	98
9.2. SOM	103
9.2.1. Clasificaciones preliminares realizadas con ACP y K-MEANS	103
9.2.2. Clasificaciones utilizando el Algoritmo SOM	103
9.2.3. Clasificación 1	104
9.2.4. Visualización de la Clasificación 1 en un conjunto de baja dimensión	107
9.2.5. Clasificación 2	110
9.3. Análisis de Casos	112
9.4. Análisis de Tendencia	118
10. Conclusiones de la segunda parte	120
10.1. Resumen de resultados obtenidos	120
10.2. Proyecciones del trabajo	122
11. Conclusiones generales	123

12. Glosario	124
Bibliografía	125
A. Ecuaciones de la Meteorología y de la Dispersión	128
B. Métodos de Agrupamiento K-MEANS y SOM	131
B.1. K-MEANS	131
B.2. SOM	133
C. Pseudocódigo del algoritmo Recocido Simulado	138

Índice de figuras

2.1. Esquema de la relación entre los grados de libertad y el factor Λ de la descomposición en valores singulares de la matriz de sensibilidad	21
3.1. Esquema de la relación entre una red de monitoreo y su matriz de sensibilidad	30
4.1. Densidad poblacional (INE 2002) para la Región Metropolitana	42
4.2. Densidad poblacional (INE 2002) para la grilla de emisión	43
4.3. Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el incremento de la cantidad de información con peso poblacional 0.3 y 0.5	45
4.4. Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el incremento de la cantidad de información con peso poblacional 0.7	46
4.5. Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para los grados de libertad con peso poblacional 0.3 y 0.5	47
4.6. Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para los grados de libertad con peso poblacional 0.7	48
4.7. Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el rango efectivo con peso poblacional 0.3 y 0.5	49
4.8. Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el rango efectivo con peso poblacional 0.7	49
4.9. Reducción de la red MACAM-2009 para el incremento de la cantidad de información con peso poblacional 0 y 0.7	51
4.10. Reducción de la red MACAM-2009 para los grados de libertad con peso poblacional 0 y 0.7	53
4.11. Dendrogramas para las métricas <i>average/cosine</i> y <i>ward/cor</i> en base a la sensibilidad de la red MACAM-2009	56
4.12. Evolución histórica de la modificación al incremento de la cantidad de información para la red MACAM	58
4.13. Reducción de la red MACAM-2009 con peso poblacional 0 y 0.7, considerando conjuntamente las estaciones O y R	60
4.14. Evolución del indicador de separación y mapa de precisión para la red óptima MAX-MIN, con condición inicial MACAM-2009	63
4.15. Red óptima MAX-MIN, con condición inicial MACAM-2009	63
4.16. Evolución del incremento de la cantidad de información y mapa de precisión para la red óptima, con condición inicial MACAM-2009	64
4.17. Red óptima para el incremento de la cantidad de información, con condición inicial MACAM-2009	64

4.18. Evolución del incremento de la cantidad de información y mapa de precisión para la red óptima, con condición inicial MAX-MIN	65
4.19. Red óptima para el incremento de la cantidad de información, con condición inicial MAX-MIN	65
4.20. Evolución del incremento de la cantidad de información y mapa de precisión para la red óptima, con condición inicial RANDOM	66
4.21. Red óptima para el incremento de la cantidad de información, con condición inicial RANDOM	66
4.22. Evolución de los grados de libertad y mapa de precisión para la red óptima, con condición inicial MACAM-2009	67
4.23. Red óptima para los grados de libertad, con condición inicial MACAM-2009	67
4.24. Evolución de los grados de libertad y mapa de precisión para la red óptima, con condición inicial MAX-MIN	68
4.25. Red óptima para los grados de libertad, con condición inicial MAX-MIN	68
4.26. Evolución de los grados de libertad y mapa de precisión para la red óptima, con condición inicial RANDOM	69
4.27. Red óptima para los grados de libertad, con condición inicial RANDOM	69
4.28. Evolución del rango efectivo y mapa de precisión para la red óptima, con condición inicial MACAM-2009	70
4.29. Red óptima para el rango efectivo, con condición inicial MACAM-2009	70
4.30. Evolución del rango efectivo y mapa de precisión para la red óptima, con condición inicial MAX-MIN	71
4.31. Red óptima para el rango efectivo, con condición inicial MAX-MIN	71
4.32. Evolución del rango efectivo y mapa de precisión para la red óptima, con condición inicial RANDOM	72
4.33. Red óptima para el rango efectivo, con condición inicial RANDOM	72
4.34. Comparación de redes óptimas, para condición inicial MACAM-2009	74
4.35. Comparación de redes óptimas, para condición inicial MAX-MIN	75
4.36. Comparación de redes óptimas, para condición inicial RANDOM	76
4.37. Comparación de la evolución indicador de la calidad	77
4.38. Comparación de redes óptimas, para el incremento de la cantidad de información	78
4.39. Comparación de redes óptimas, para los grados de libertad	79
4.40. Comparación de redes óptimas, para el rango efectivo	80
4.41. Resumen de la comparación de redes óptimas	81
6.1. Frecuencia de bajas segregadas en el Hemisferio Sur	87
6.2. Climatología estacional del Alta del Pacífico Suroriental y el Jet Subtropical del Pacífico Sur	89
6.3. Climatología mensual de una sección latitudinal del STJ	90
6.4. Climatología mensual del PH	91
7.1. Serie de tiempo del número de sondeos	93
7.2. Histograma mensual del número de sondeos	93
8.1. Distribución de valores faltantes en los perfiles de ozono y viento zonal	95
8.2. Serie de tiempo del número de perfiles de ozono admisibles	96

8.3. Histograma del número de perfiles de ozono admisibles	96
9.1. Ciclo anual de ozono y viento zonal sobre Rapa Nui	99
9.2. Ciclo anual de vorticidad potencial, velocidad vertical ω y gradiente de temperatura potencial sobre Rapa Nui	101
9.3. Clasificación de los perfiles de ozono en le rango 0.5-15 <i>km</i> e histogramas normalizados de los meses de cada perfil	107
9.4. Primera y segunda componente principal para el rango 0.5-15 <i>km</i>	109
9.5. Mapa de proyección para el rango 0.5-15 <i>km</i>	109
9.6. Clasificación de los perfiles de ozono en le rango 0.5-7.5 <i>km</i> e histogramas normalizados de los meses de cada perfil	111
9.7. Caso del 28-08-2009	113
9.8. Análisis sinóptico caso 28-08-2009.	114
9.9. Caso del 4-10-1996	116
9.10. Análisis sinóptico caso 4-oct-1996.	117
9.11. Análisis de tendencia para la razón de mezcla de ozono	119
B.1. Ejemplos de topologías	134
B.2. Ejemplos de formas globales	134
B.3. Ejemplo de iteración del algoritmo SOM	136

Capítulo 1

Introducción y Objetivos

Las Ciencias Atmosféricas requieren para su descripción y análisis de herramientas matemáticas complejas que permitan estudiar eficientemente la información incompleta y típicamente provista de incertidumbre que proporcionan diversos Sistemas de Observación Meteorológica. La Teoría de la Observación estudia este tipo de sistemas, entregando un marco matemático claro que permite introducir los conceptos de asimilación, error, precisión, calidad y optimalidad de las observaciones. Cuando se cuenta con un modelo del fenómeno observado, es posible utilizar esta teoría para mejorar estimaciones o determinar parámetros propios de éste. Por el contrario, si no se cuenta con modelo, esta teoría permite -a través de un proceso estadístico de asimilación- descubrir en las observaciones alguna estructura interna a partir de la cual proponer mecanismos descriptivos que posteriormente podrían ser utilizados en la configuración de un modelo. En este trabajo se muestran dos aplicaciones de este tipo de herramientas.

En la primera parte se propondrán metodologías para el diseño óptimo de redes de monitoreo ambiental utilizando la información entregada por simulaciones de un modelo de dispersión de CO para la región de Santiago de Chile. Dichas metodologías se elaborarán basándose en la Teoría de Observación (Johnson, 2003 [15]; Kalnay, 2003 [16]), según la cual una red de monitoreo se puede entender como un sistema de observación que registra parcialmente una señal que posee información acerca de la concentración de los contaminantes (Wu & Bocquet, 2011 [1]; Osses et al., 2012 [24]).

En la segunda parte se realizará un estudio de la estructura espacial y temporal del ozono troposférico sobre Rapa Nui mediante la aplicación de un análisis estadístico complejo a sondeos de ozono realizados sobre la isla. Dicho análisis se basa en la Teoría de Mapas Auto Organizantes, según la cual la información entregada por los datos es asimilada a lo largo de un proceso de aprendizaje para luego ser expresada en relaciones geométricas simples que permiten identificar los rasgos más característicos de los datos (Kohonen et al., 1990 [19]).

El objetivo principal de esta tesis es evaluar la aplicabilidad de la Teoría de la Observación y Asimilación al estudio de Sistemas de Observación Meteorológica en el caso en que se cuenta con un modelo que describe el fenómeno observado -dispersión de CO para la región de Santiago de Chile- y en el caso en que no -caracterización de ozono troposférico en Rapa Nui-.

1.1. Introducción a la primera parte

Desde las últimas décadas, uno de los principales problemas asociados a las megaciudades corresponde al alto nivel de contaminación atmosférica (WMO/IGAC Impact of Megacities on Air Pollution and Climate, GAW report 205, 2012 [12]). El tipo de contaminantes atmosféricos presentes y la estructura de su distribución espacial y temporal se atribuyen a una serie de factores que dependen de las características propias de cada megaciudad, como lo son las condiciones geográficas y meteorológicas de la región en donde ésta se encuentra, el tipo y la distribución de la producción industrial, la distribución de la población y las características del tráfico, entre otras (Saide et al., 2011 [28]). Por lo tanto, para estudiar éste complejo fenómeno, resulta necesario contar con redes de monitoreo cuyo diseño sea capaz de tomar en cuenta tal diversidad de factores involucrados.

Toda metodología de diseño de redes de monitoreo debe estar en concordancia con los objetivos específicos planteados para esa red y debe ser tal que satisfaga de la mejor manera dichos objetivos. Estas metodologías de diseño pueden obtenerse a partir la teoría de la observación, según la cual toda red de monitoreo puede ser entendida como un sistema de observación que registra, de manera parcial, una señal ruidosa que posee información acerca de la concentración de los contaminantes. Más aún, es posible hablar de optimalidad en el diseño, al cuantificar, a través de un indicador de la calidad, la capacidad de la red para satisfacer los objetivos específicos que le han sido asignados.

Desde el punto de vista de las ciencias atmosféricas, los principales objetivos de una red de monitoreo están asociados a la caracterización de la dispersión de contaminantes. Desde el punto de vista de la salud, los principales objetivos de una red de monitoreo están asociados al cumplimiento de la legislación local de calidad del aire, a la activación oportuna de las medidas de emergencia para episodios críticos de contaminación y a la estimación del impacto de estas medidas.

La ciudad de estudio de este trabajo corresponde a Santiago de Chile. Sus características geográficas complejas dificultan la observación y modelación de la dispersión de contaminantes y sus altos niveles de contaminación atmosférica la posicionan durante el invierno entre una de las ciudades más contaminadas del continente, registrando serios daños a la salud de sus habitantes.

1.1.1. Aspectos meteorológicos de la contaminación atmosférica en Santiago

La cuenca de Santiago (33.5°S , 70.8°W) se ubica en el borde occidental de Sudamérica subtropical, al oeste de la Cordillera de los Andes y a unos 100 km de la costa. En estas latitudes, la altura media de la Cordillera de los Andes y de la Costa superan los 4500 m.a.s.l y 1200 m.a.s.l , respectivamente (Garreaud & Rutland, 2006 [9]; Saide et al., 2011 [28]).

La circulación media en la cuenca de Santiago está determinada por la interacción entre el relieve regional y la subsidencia de gran escala inducida por el anticiclón subtropical del Pacífico suroriental. En la costa, a los 33°S , el gradiente de temperatura entre el aire

subsidente -calentado por compresión- y las aguas superficiales frías, mantiene una capa de inversión térmica con alturas de la base y del tope de la inversión del orden de 600 *m* y 1200 *m*, respectivamente. Ésto da origen a una capa de mezcla marina con un alto contenido de humedad, la cual queda generalmente separada del valle interior por la Cordillera de la Costa, limitando la entrada de aire húmedo a la cuenca de Santiago.

La inversión térmica de subsidencia también se observa frecuentemente sobre la cuenca de Santiago, con un tope medio semejante al de la costa. Sin embargo, el ciclo diario de insolación de la superficie terrestre tiene un efecto significativo sobre la base e intensidad de la inversión. Durante la noche, el enfriamiento radiativo produce una marcada inversión térmica, la cual se acopla con la inversión de subsidencia formando una capa estable desde la superficie de la cuenca hasta unos 600 *m* sobre ella. En Muñoz & Undurraga, 2010 [23] se muestra que la altura de la capa de mezcla -a las 1200LT (UTC-4 *h*)- es del orden de 200 *m* en los meses fríos y 800 *m* en los meses cálidos. Estas condiciones inhiben la dispersión vertical, concentrando los contaminantes cerca de su nivel de emisión. Posteriormente, a medida que sale el sol, la radiación comienza a calentar la superficie y el aire inmediatamente por encima de ésta. La turbulencia inducida por este calentamiento debilita gradualmente y desde abajo la inversión térmica, dando paso a una capa bien mezclada de contaminantes.

Entre el tope de la Cordillera de los Andes y los 2000 *m.a.s.l*, predomina el viento del noroeste, sin variaciones diarias significativas. Bajo los 2000 *m.a.s.l* se aprecia un marcado ciclo diario en la componente zonal del viento. Entre la superficie y los 500 *m*, esta variabilidad diaria se encuentra principalmente determinada por la interacción valle-montaña. Durante la noche predomina un débil viento del este, y durante el día predomina un viento del suroeste, de componente sur inducida por el gradiente de presión de gran escala. Las condiciones de viento en superficie son similares, con vientos del suroeste de 2 *m/s* durante el día, capaces de transportar los contaminantes atmosféricos horizontalmente dentro de la cuenca.

En verano, la ausencia de perturbaciones de escala sinóptica propias de la región -como frentes y bajas costeras- hace que la concentración de los contaminantes dependa exclusivamente de los patrones de circulación media antes descritos. Además, el aumento de la radiación solar incidente permite un mayor desarrollo de la capa de mezcla, facilitando la ventilación de los contaminantes fuera de la cuenca. Sin embargo, tal incremento radiativo promueve la formación fotoquímica de contaminantes como el ozono troposférico.

En invierno, la ausencia de condiciones favorables para la dispersión -producto de una debilitada circulación media- hace que la concentración de los contaminantes dependa principalmente de la ocurrencia de los eventos sinópticos antes mencionados. El paso de un frente suprime la inversión térmica -producto de la sustitución de la subsidencia anticiclónica por el flujo ascendente que ocurre en torno al centro de baja presión-, aumenta la magnitud del viento en niveles bajos y, en algunos casos, viene acompañado de precipitación, promoviendo la disminución de los contaminantes atmosféricos mediante ventilación y deposición húmeda.

Por otro lado, el paso de este tipo de perturbaciones sinópticas, puede implicar la formación de bajas costeras, las cuales, al intensificar la subsidencia sobre la cuenca, reducen la altura de la capa de mezcla por debajo de su valor característico invernal, aumentando significativamente la concentración de los contaminantes en su nivel de emisión. Los eventos de bajas costeras están típicamente asociados a eventos críticos de emergencia ambiental.

1.1.2. Evolución de la red de monitoreo de calidad del aire MACAM

La red de monitoreo de calidad del aire para Santiago de Chile es la red MACAM (Monitoreo Automático de Contaminantes Atmosféricos de la Región Metropolitana). Ésta se puso en funcionamiento el año 1988, con un total de 4 estaciones fijas ubicadas en el centro de Santiago -La Paz o Independencia (F), Providencia (B), Parque o Santiago Centro (N) y Gotuzzo (A)- más una estación móvil (M), asociada al borde noreste de la cuenca.

En el año 1997, Santiago fue declarada Zona Saturada (niveles superiores a la norma) para material particulado parcialmente respirable (PM10), monóxido de carbono (CO) y ozono (O3); y Zona Latente (niveles entre el 80 % y el 100 % de la norma) para dióxido de nitrógeno (NO2). Tal declaración fue el paso previo a la formulación del Plan de Prevención y Descontaminación Atmosférica de la Región Metropolitana (PPDA), el cual tenía por objetivo la recuperación de la calidad del aire en Santiago. Con el fin de verificar el cumplimiento del PPDA, la red MACAM fue expandida geográficamente. La estación de Gotuzzo (A) fue removida, la estación móvil (M) se fijó en Las Condes y se agregaron 4 estaciones, Cerrillos (P), Pudahuel (O), La Florida (L) y El Bosque (Q). Posteriormente, en el año 2002 la estación de Providencia (B) fue removida, pues el espacio físico en donde estaba instalada no contaba con las condiciones necesarias para su correcto funcionamiento. En el año 2005 se agrega la estación de Cerro Navia (R) y finalmente, en el año 2009, se agregan 3 estaciones en los sectores suburbanos y semirurales de Quilicura (V), Puente Alto (S) y Talagante (T).

Actualmente, todas las estaciones miden monóxido de carbono (CO), dióxido de azufre (SO2), ozono (O3) y material particulado parcialmente respirable (PM10). Sólo las estaciones de Pudahuel (O), Cerrillos (P) y Las Condes (M), miden óxidos de nitrógeno (NOx), y sólo las estaciones de La Florida (L), Las Condes (M), Parque (N) y Cerrillos (P), miden material particulado totalmente respirable (PM2.5). Además, todas las estaciones miden velocidad del viento, temperatura y humedad relativa. Si bien, la información relativa a estas especies contaminantes y a la meteorología se encuentra disponible públicamente, en calidad de datos validados a través de la página web del Ministerio de Salud, los procedimientos de validación no se encuentran disponibles.

El estudio expuesto en este trabajo se basa en datos de CO para un periodo de verano del año 2002. Ésto se debe a que el tiempo de recambio del CO es de 3 meses, con mecanismos de remoción principalmente asociados a la oxidación por reacción con el radical hidroxilo (Saide et al., 2011 [28]). Luego, a escala urbana, el CO puede considerarse quími-

camente inerte, simplificando significativamente los aspectos químicos de la modelación de su dispersión. Por otro lado, las condiciones meteorológicas estables propias del verano permiten simplificar significativamente los aspectos meteorológicos de la modelación de la dispersión.

Considerando lo anterior, surgen preguntas como: ¿cuáles fueron los criterios utilizados en el desarrollo histórico de la red MACAM, considerando la incorporación y eliminación de estaciones?, ¿qué variables se tomaron en cuenta para la definición de tales criterios?, ¿estos criterios se aplicaron de manera semejante en todas las etapas de modificación de la red?, ¿es la distribución actual de la red MACAM la mejor distribución posible para ese número de estaciones?, ¿cuál es la disposición óptima y cómo se determina?.

1.2. Objetivos de la primera parte

1.2.1. Objetivos principales de la primera parte

1. Definir metodologías de diseño de redes de monitoreo ambiental que sean acordes a los objetivos específicos de la red.
2. Evaluar la aplicabilidad de estas metodologías al caso particular de redes de monitoreo de CO en Santiago.
3. Definir y evaluar indicadores de la calidad de una red de monitoreo de calidad del aire.
4. Establecer un marco matemático que permita plantear el diseño de redes de monitoreo ambiental en términos de una aproximación variacional a la teoría de la observación.

1.2.2. Objetivos secundarios de la primera parte

1. Definir metodologías que permitan extender una red de monitoreo de calidad del aire.
2. Definir metodologías que permitan reducir una red de monitoreo de calidad del aire.
3. Definir metodologías de diseño óptimo de redes de monitoreo ambiental con respecto a un determinado indicador de la calidad de la red.
4. Comparar los resultados de estas metodologías con los resultados de las metodogías estadísticas utilizadas en Osses et al., 2012 [24] para el mismo caso de estudio.

1.3. Introducción a la segunda parte

Las actividades antrópicas han alterado substancialmente la composición de la atmósfera en los últimos 200 años a escala regional y global (e.g., IPCC, 2007). Estos cambios tienen consecuencias en la salud humana, en los ecosistemas y en el sistema climático. Para evaluar, cuantificar y proporcionar bases para predecir estos cambios la Organización Meteorológica Mundial (WMO) ha establecido el programa Global Atmospheric Watch (GAW).

Además de contar con alrededor de 20 estaciones completamente equipadas para la medición de las condiciones basales de la atmósfera, el programa GAW posee numerosas estaciones regionales enfocadas en el estudio de los impactos climatológicos y biológicos de gases tipo invernadero, ozono y radiación ultravioleta (ver www.wmo.int).

En particular, como parte de un programa sub-regional para el cono sur de Sudamérica, 3 estaciones fueron instaladas en Chile bajo el auspicio del GAW y de la Dirección Meteorológica de Chile (DMC) hacia fines de 1995: un dispositivo de monitoreo de ozono en Rapa Nui (27°S, 109°W, 51 *m.a.s.l.*); un monitor de ozono superficial, sensores meteorológicos y radiativos en Cerro Tololo (30°S, 70°W, 2200 *m.a.s.l.*); y un espectrofotómetro en Valdivia (39.8°S, 73°W, 10 *m.a.s.l.*).

Las mediciones en Rapa Nui y Cerro Tololo se han estado haciendo desde hace dos décadas, aproximadamente. El espectrofotómetro en Valdivia se perdió en un incendio que afectó la Universidad en el año 2007 -ver [13]-. Los datos entregados por estas estaciones son valiosos. Por un lado, esta región del mundo tiene una cobertura observacional pobre, y por otro lado, estas regiones son generalmente prístinas, permitiendo una mejor detección de cambios a escala global. Hasta ahora sólo los datos recopilados en Tololo y Valdivia han sido estudiados y reportados en la literatura científica especializada (e.g., Gallardo et al, 2000 [7]; Lovengren et al, 2000 [22]; Rondanelli et al, 2002 [26]). Los datos de Rapa Nui, hasta donde se sabe, no han sido revisados en revistas científicas de corriente principal, pero sí en tesis de grado (Valdés, 2003 [34]; Cuevas, 2006 [2]) y reportes internos de la DMC (Fuenzalida, 2011 [5]).

En este trabajo se da un primer análisis estadístico completo de 186 sondeos válidos realizados en Rapa Nui durante el periodo 1994-2010. Consideramos la climatología tradicional en términos de ciclos anuales y estacionales (e.g., Logan, 1985 [21]), y, por otro lado, un análisis basado en técnicas de agrupamiento o cluster (e.g., Diab et al, 2003 [3]), incluyendo self-organizing-maps (e.g., Kohonen et al, 1990 [19]; Jensen et al, 2012 [14]).

Sostenemos que la estación ubicada en Rapa Nui debe ser cuidadosamente mantenida y expandida, incluyendo por lo menos mediciones de ozono superficial y de óxidos de nitrógeno. Esta estación se ubica en un área prístina en el pobremente monitoreado Pacífico Sur, siendo representativa de la zona de transición entre masas de aire tropical y subtropical (Fuenzalida et al., 2005 [6]). Además, tales mediciones podrían ser útiles para detectar cambios potenciales debido al crecimiento poblacional y turístico en Isla de Pascua que podrían resultar en un incremento de las emisiones locales en conexión con la quema de desperdicios (Instituto de Estudios Urbanos y Territoriales UC, 2012 [33]).

1.4. Objetivos de la segunda parte

1.4.1. Objetivos principales de la segunda parte

1. Documentar el estado y las características de la base de datos de ozono de Rapa Nui.
2. Estudiar la estructura temporal y espacial del ozono troposférico en la región de Rapa Nui.
3. Identificar y proponer mecanismos meteorológicos de transporte que expliquen la estructura de ozono troposférico en la región de Rapa Nui.
4. Evaluar la utilidad de métodos de agrupamiento-asimilación basados en la Teoría de Mapas Auto Organizantes (Self Organizing Maps, SOM) para el estudio de la estructura de ozono troposférico en la región de Rapa Nui, y su desempeño respecto de métodos de agrupamiento de menor complejidad como el análisis de componentes principales y el agrupamiento tipo *k-means*.

1.4.2. Objetivos secundarios de la segunda parte

1. Identificar el impacto de los procesos de intercambio estratósfera-tropósfera en la estructura de ozono troposférico en la región de Rapa Nui.
2. Comparar los resultados de este trabajo con las investigaciones análogas realizadas por otros autores para estaciones tropicales y subtropicales.

Parte I

Diseño Óptimo de Redes de Monitoreo de Calidad del Aire

Capítulo 2

Introducción a la Teoría de la Observación

La Teoría de la Observación y Asimilación -en particular la referente al estimador BLUE- es de uso estandar y puede encontrarse desarrollada en Fischer, 2003 [4]. Si bien, en el contexto particular de Sistemas de Observación en Ciencias Atmosféricas, esta teoría ha sido desarrollada específicamente para aplicaciones en Meteorología -Kalnay, 2003 [16] y Johnson, 2003 [15]-, no existen aplicaciones en Dispersión de Contaminantes.

En este capítulo se revisarán los conceptos básicos de la Teoría de la Observación y Asimilación -Espacio de Estados, Espacio de Observación, Operador de Observación, Error y Precisión- necesarios para la construcción del estimador BLUE y para la definición de *Indicadores de la Calidad de un Sistema de Observación*.

2.1. Definiciones preliminares

Sean $n, m \in \mathbb{N}$. Nos referiremos a \mathbb{R}^n como *espacio de estados* y a \mathbb{R}^m como *espacio de observaciones*. Sea la aplicación diferenciable

$$\mathcal{H} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$$

que denominaremos *operador de observación*. Fijemos un *vector de estado* $X_t \in \mathbb{R}^n$.

Definamos las siguientes variables aleatorias a valores en \mathbb{R}^n : X_b , que denominaremos *estimación a priori*, y ε_b , que denominaremos *error en la estimación a priori*. Supondremos que $X_b = X_t + \varepsilon_b$ y que $\mathbb{E}(\varepsilon_b) = 0$, con lo cual se tendrá que $\mathbb{E}(X_b) = X_t$. Por último denotemos por $B = \mathbb{E}(\varepsilon_b \varepsilon_b^t) = \text{Var}(X_b)$ a la matriz de covarianza de la estimación a priori, la cual supondremos definida positiva, y denotemos por *precisión del pronóstico* a su inversa B^{-1} .

Definamos las siguientes variables aleatorias a valores en \mathbb{R}^m : Y_o , que denominaremos *observación*, y ε_o , que denominaremos *error en la observación*. Supondremos que $Y_o = \mathcal{H}(X_t) + \varepsilon_o$ y que $\mathbb{E}(\varepsilon_o) = 0$, con lo cual se tendrá que $\mathbb{E}(Y_o) = \mathcal{H}(X_t)$. Por último denotemos por $C = \mathbb{E}(\varepsilon_o \varepsilon_o^t) = \text{Var}(Y_o)$ a la matriz de covarianza de la observación, la cual supondremos definida positiva, y denotemos por *precisión de la observación* a su inversa

C^{-1} .

En este contexto el estado X_t corresponde a una variable desconocida, de la cual sólo se tiene información parcial a partir su estimación a priori X_b y de su observación Y_o . Luego, es de interés construir un *estimador a posteriori* del estado, o *análisis*, que incluya conjuntamente la información aportada por el estimador a priori y por la observación.

El operador de observación \mathcal{H} es, en general, no lineal. Por simplicidad supondremos que \mathcal{H} es, en buena aproximación, lineal afin en una vecindad de la estimación a priori, es decir $\exists \rho > 0 \forall X \in B_\rho(X_b)$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(X) &= \mathcal{H}(X_b) + H(X - X_b) + o(|X - X_b|^2) \\ &\approx \mathcal{H}(X_b) + H(X - X_b)\end{aligned}$$

en donde $H \in \mathcal{M}_{m \times n}$ corresponde a la matriz jacobiana del operador de observación, que denominaremos *matriz de sensibilidad*. Intuitivamente, la matriz de sensibilidad H da una medida de la capacidad que posee el sistema de observar cambios en la variable de estado, razón por la cual será de fundamental importancia durante el resto de este trabajo.

2.2. Estimador BLUE (Best Linear Unbiased Estimator)

2.2.1. Construcción del estimador BLUE

Definamos las siguiente variables aleatorias a valores en \mathbb{R}^n : X_a , que denominaremos *análisis*, y ε_a , que denominaremos *error en el análisis*. En base a lo comentado en la sección anterior, supondremos que $X_a = X_t + \varepsilon_a$. Sea $d = Y_o - \mathcal{H}(X_b)$, que denominaremos *innovación* y sea $W \in \mathcal{M}_{n \times m}$, que denominaremos *matriz de ganancia*.

Para la construcción del estimador BLUE impondremos las siguientes condiciones:

1. Insesgabilidad con respecto al estado: $\mathbb{E}(X_a) = X_t$.
2. Linealidad afin con respecto a la estimación a priori y a la observación: $X_a = X_b + W(Y_o - \mathcal{H}(X_b))$. Es decir, el análisis corresponderá a una corrección del estado a priori a partir de las observaciones, en donde el peso que se le da a estas últimas estará dado por la matriz de ganancia.
3. Minimalidad de la varianza del análisis con respecto a la ganancia: Si $P = \text{Var}(X_a)$, entonces la matriz de ganancia W es escogida como solución del problema

$$\min_{W \in \mathcal{M}_{nm}(\mathbb{R})} \text{Tr}(P) \quad (2.1)$$

De la condición 1 se tiene que $\mathbb{E}(\varepsilon_a) = 0$ y es posible probar que el óptimo en (2.1) se alcanza tomando $W = BH^t(C + HBH^t)^{-1}$, con lo cual el estimador BLUE toma la forma

$$X_a = X_b + BH^t(C + HBH^t)^{-1}(Y_o - \mathcal{H}(X_b)) \quad (2.2)$$

Notemos que el término BH^t corresponde a una ponderación de la varianza de la estimación a priori y el término $C + HBH^t$ corresponde a una suma ponderada entre la varianza de la observación y de la estimación a priori. Por lo tanto $BH^t(C + HBH^t)^{-1}$ puede interpretarse como la *varianza relativa a la estimación a priori*.

Es posible obtener una expresión equivalente del estimador BLUE a partir de la minimización del siguiente funcional

$$J(X) = \frac{1}{2}(X - X_b)^t B^{-1}(X - X_b) + \frac{1}{2}(Y_o - \mathcal{H}(X))^t C^{-1}(Y_o - \mathcal{H}(X)) \quad (2.3)$$

Nuevamente consideraremos la linealización del operador de observación en torno a la estimación a priori, con lo cual el funcional en (2.3) toma la forma la cuadrática

$$J(X) = \frac{1}{2}(X - X_b)^t B^{-1}(X - X_b) + \frac{1}{2}(Y_o - \mathcal{H}(X_b) - H(X - X_b))^t C^{-1}(Y_o - \mathcal{H}(X_b) - H(X - X_b)) \quad (2.4)$$

Derivando e igualando a cero, vemos que el único punto estacionario X^* del funcional corresponde a

$$X^* = X_b + (B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1} H^t C^{-1} (Y_o - \mathcal{H}(X_b)) \quad (2.5)$$

Notemos que X^* es lineal afín en la estimación a priori y en la observación, con matriz de ganancia igual a $(B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1} H^t C^{-1}$. El término $H^t C^{-1}$ corresponde a una ponderación de la precisión de la observación y el término $B^{-1} + H^t C^{-1} H$ corresponde a una suma ponderada entre la precisión de la estimación a priori y de la observación. Por lo que el término $(B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1} H^t C^{-1}$ puede interpretarse como la *la precisión relativa a la observación*.

Del teorema de Sherman-Morrison-Woodbury se tiene que

$$BH^t(C + HBH^t)^{-1} = (B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1} H^t C^{-1}$$

y por lo tanto X^* corresponde al estimador BLUE.

Finalmente, para la matriz de ganancia óptima $W = (B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1} H^t C^{-1}$, es posible probar que la precisión del análisis está dada por

$$P^{-1} = B^{-1} + H^t C^{-1} H$$

2.2.2. El estimador BLUE en términos de la descomposición en valores singulares de H

Consideremos la descomposición en valores singulares (SVD) -Golub, 1996 [10]- de la matriz de sensibilidad

$$H = U \Lambda V^t \quad (2.6)$$

en donde

1. $H \in \mathcal{M}_{m \times n}$ y denotemos por $r = \text{rg}(H)$.
2. $U \in \mathcal{M}_{m \times m}$, es unitaria con m vectores columna $\{u_1, \dots, u_m\} \subset \mathbb{R}^m$, que denominaremos *vectores singulares izquierdos*.

Luego, estos vectores forman una base ortogonal de \mathbb{R}^m para el producto interno inducido por U .

3. $V \in \mathcal{M}_{n \times n}$, es unitaria con n vectores columna $\{v_1, \dots, v_n\} \subset \mathbb{R}^n$, que denominaremos *vectores singulares derechos*.

Luego, estos vectores forman una base ortogonal de \mathbb{R}^n para el producto interno inducido por V .

4. $\Lambda \in \mathcal{M}_{m \times n}$ es diagonal tal que los elementos de la diagonal verifican $\lambda_1 > \dots > \lambda_r > \lambda_{r+1} = \dots = \lambda_{\min(n,m)} = 0$.

Esta descomposición posee la siguiente interpretación geométrica (Johnson, 2003 [15]):

Sea ξ_1, \dots, ξ_n la base canónica de \mathbb{R}^n y sea ψ_1, \dots, ψ_m la base canónica de \mathbb{R}^m .

La matriz unitaria V^t corresponde a un operador de rotación en \mathbb{R}^n y en particular, para todo vector singular derecho v_j , se tiene que $V^t v_j = \xi_j$. Es decir V^t rota los vectores singulares derechos transformándolos en la base canónica.

A su vez, la matriz diagonal Λ corresponde a un operador de rescalamiento de \mathbb{R}^n en \mathbb{R}^m y en particular se tendrá que para todo $j \in \{1, \dots, r\}$, $\Lambda V^t v_j = \lambda_j \xi_j$, y para todo $j \in \{r+1, \dots, n\}$, $\Lambda V^t v_j = 0$. Es decir, Λ transforma la bola unitaria de \mathbb{R}^n en un elipsoide de dimensión r con su j -ésimo semieje principal de largo λ_j y orientado según la dirección canónica ψ_j .

Finalmente, la matriz unitaria U corresponde a un operador de rotación en \mathbb{R}^m .

Por lo tanto, la relación $H v_j = \lambda_j u_j$, $\forall j \in \{1, \dots, n\}$ indica que el conjunto de vectores singulares derechos $\{v_1, \dots, v_r\}$ es mapeado en un elipsoide de dimensión r con semiejes principales dados por $\{u_1, \dots, u_r\}$.

Supongamos que $B = \sigma_b^2 I_n$ y que $C = \sigma_o^2 I_m$, denotemos por $\mu^2 = \frac{\sigma_o^2}{\sigma_b^2}$ y recordemos que la innovación está definida por $d = Y_o - \mathcal{H}(X_b)$. Considerando la descomposición en valores singulares de H en la ecuación (2.5), se tendrá que

$$\begin{aligned}
 X_a &= X_b + (B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1} H^t C^{-1} (Y_o - \mathcal{H}(X_b)) \\
 &= X_b + V (\mu^2 I_n + \Lambda^t \Lambda)^{-1} \Lambda^t U^t d \\
 &= X_b + \sum_{j=1}^r \left[\frac{\lambda_j (u_j^t d)}{\mu^2 + \lambda_j^2} \right] v_j \\
 &= X_b + \sum_{j=1}^r f_j \frac{u_j^t d}{\lambda_j} v_j
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

en donde $f_j = \frac{\lambda_j^2}{\mu^2 + \lambda_j^2}$ con $j \in \{1, \dots, r\}$, son los denominados *Factores de Filtro de Tykhonov*.

Esta expresión para el análisis, en términos de la descomposición en valores singulares de H posee la siguiente interpretación:

El análisis

$$X_a = X_b + \sum_{j=1}^r f_j \frac{u_j^t d}{\lambda_j} v_j$$

se obtiene a partir de una corrección de la estimación a priori en base a las observaciones.

El término correctivo

$$\sum_{j=1}^r f_j \frac{u_j^t d}{\lambda_j} v_j$$

corresponde a una suma ponderada entre los vectores singulares derechos no pertenecientes al núcleo de H , en donde el peso de cada vector singular derecho v_j está dado por

$$f_j \frac{u_j^t d}{\lambda_j}$$

Notemos que el factor de filtro de Tykhonov f_j depende de la relación entre el valor singular λ_j y el parámetro μ . Si $\lambda_j \ll \mu$ entonces $f_j \approx \frac{\lambda_j^2}{\mu^2}$, reduciendo la importancia del vector singular derecho v_j en el cálculo del análisis. Análogamente, si $\lambda_j \gg \mu$ entonces $f_j \approx 1$, aumentando la importancia del vector singular derecho v_j en el cálculo del análisis.

Por otro lado, el factor $\frac{u_j^t d}{\lambda_j}$ depende de la relación entre la proyección de la innovación d sobre el vector singular izquierdo u_j y el valor singular λ_j .

2.3. Indicadores de la Calidad del Operador de Observación

2.3.1. Precisión, Cantidad de Información y Recuperabilidad

Fijemos un vector de estado X_t . Sean X_b la estimación a priori asociada a X_t y sea Y_o la observación de X_t , a través de un operador de observación con matriz de sensibilidad H .

De la ecuación (2.5) se tiene que el análisis X_a está dado por

$$X_a = X_b + (B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1} H^t C^{-1} (Y_o - \mathcal{H}(X_b)) \quad (2.8)$$

Supondremos, como se hizo en la sección 2.2.2, que $B = \sigma_b^2 I_n$ y que $C = \sigma_o^2 I_m$, y denotemos por $\mu^2 = \frac{\sigma_o^2}{\sigma_b^2}$ y $r = \text{rg}(H)$.

Precisión

La precisión del análisis está dada por

$$P^{-1} = B^{-1} + H^t C^{-1} H$$

Se define la *precisión del operador de observación* como

$$\begin{aligned} f_P(H) &= \text{Tr} (P^{-1}) \\ &= \text{Tr} \left(\frac{1}{\sigma_b^2} I_n + \frac{1}{\sigma_o^2} H^t H \right) \\ &= \frac{1}{\sigma_b^2} \text{Tr} \left(I_n + \frac{H^t H}{\mu^2} \right) \\ &= \frac{n}{\sigma_b^2} + \frac{1}{\sigma_b^2} \text{Tr} \left(\frac{H^t H}{\mu^2} \right) \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$= \frac{n}{\sigma_b^2} + \frac{1}{\sigma_b^2} \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \quad (2.10)$$

Cantidad de información

Sea $n \in \mathbb{N}$ y sea X una variable aleatoria a valores en \mathbb{R}^n , con densidad de probabilidad p_X . Se define la *entropía* asociada a X como

$$h(X) = \int_{\mathbb{R}^n} p_X(x) \ln \frac{1}{p_X(x)} dx$$

Si $X \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_X)$, con $\Sigma_X = \text{Var}(X)$, entonces la entropía toma la forma

$$h(X) = \frac{n}{2} (1 + \ln(2\pi)) + \frac{1}{2} \ln |\Sigma_X|$$

Se define el *incremento de la cantidad de información del operador de observación* como

$$\begin{aligned} f_I(H) &= h(X_b) - h(X_a) \\ &= \frac{1}{2} \ln |B| - \frac{1}{2} \ln |(B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1}| \\ &= \frac{1}{2} \ln |B| + \frac{1}{2} \ln |B^{-1} + H^t C^{-1} H| \\ &= \frac{1}{2} \ln \left| I_n + \frac{H^t H}{\mu^2} \right| \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^r \ln \left(1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right) \quad (2.12)$$

Recuperabilidad: Rango Combinado y Efectivo

Consideremos la expresión para el análisis X_a en función de los valores singulares de H

$$X_a = X_b + \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{(\mu^2 + \lambda_i^2)} \frac{u_i^t d}{\lambda_i} v_i \quad (2.13)$$

Se define el *rango combinado del operador de observación* como

$$r_c(H) = \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{\mu^2 + \lambda_i^2} \quad (2.14)$$

Dado que $\forall i \in \{1, \dots, r\} : \frac{\lambda_i^2}{\mu^2 + \lambda_i^2} < 1$, se tiene que $r_c(H) < r$. El nombre de esta función viene de la siguiente interpretación informal:

Sean los conjuntos

$$I_{\ll} = \{i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i \ll \mu\} \quad I_{\sim} = \{i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i \sim \mu\} \quad I_{\gg} = \{i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i \gg \mu\}$$

Según fue comentado en la sección 2.2.2, el conjunto I_{\ll} está asociado los vectores de estado que *debido al ruido μ intrínseco del sistema* no son recuperables a partir de las observaciones; y el conjunto I_{\gg} está asociado a los vectores de estado que *a pesar del ruido μ intrínseco del sistema* son recuperables a partir de las observaciones. Lo anterior motiva la definición del *rango efectivo de un operador de observación* como

$$\begin{aligned} r_e(H) &= |\{i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i \gg \mu\}| \\ &= |I_{\gg}| \end{aligned} \quad (2.15)$$

Luego, con estas definiciones, se tiene que

$$\begin{aligned} r_c(H) &= \sum_{i \in I_{\ll}} \frac{\lambda_i^2}{\mu^2 + \lambda_i^2} + \sum_{i \in I_{\sim}} \frac{\lambda_i^2}{\mu^2 + \lambda_i^2} + \sum_{i \in I_{\gg}} \frac{\lambda_i^2}{\mu^2 + \lambda_i^2} \\ &\approx \frac{1}{\mu^2} \sum_{i \in I_{\ll}} \lambda_i^2 + \frac{1}{2} |I_{\sim}| + |I_{\gg}| \\ &= \frac{1}{\mu^2} \sum_{i \in I_{\ll}} \lambda_i^2 + \frac{1}{2} |I_{\sim}| + r_e(H) \end{aligned}$$

en donde se ve que el rango combinado es una combinación entre un término lineal afín a la precisión de una porción del operador de observación, $\frac{1}{\mu^2} \sum_{i \in I_{\ll}} \lambda_i^2$, y el rango efectivo $r_e(H)$.

2.3.2. Grados de libertad

Definición de los Grados de Libertad y su relación con el Rango Efectivo

Para introducir el concepto de los *grados de libertad* -Fisher, 2003 [4]- recordemos que la matriz de precisión del análisis está dada por $P^{-1} = B^{-1} + H^t C^{-1} H$. Por el momento no supondremos ninguna estructura diagonal para las matrices B y C .

Consideremos una transformación lineal del espacio de estados $X_L = LX$ con $L \in \mathcal{M}_{n \times n}$ invertible y denotemos por

$$P_L = \text{Var}(LX_a) = LP_L^t$$

$$B_L = \text{Var}(LX_b) = LBL^t$$

a las matrices de varianza de la transformación del análisis y de la estimación a priori, respectivamente.

Se prueba que el incremento de la cantidad de información es invariante frente a transformaciones lineales del espacio de estados, es decir

$$\forall L \in \mathcal{M}_{n \times n} : \frac{1}{2} \ln|B| - \frac{1}{2} \ln|P| = \frac{1}{2} \ln|B_L| - \frac{1}{2} \ln|P_L|$$

Luego, supongamos convenientemente que L es tal que $LBL^t = I_n$ y consideremos la diagonalización $P_L = WDW^t$, con W matriz ortonormal de vectores propios y $D = \text{diag}(\delta_1, \dots, \delta_n)$ matriz diagonal de valores propios. Entonces se tendrá que $WLB(WL)^t = I_n$ y por lo tanto

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \ln|B| - \frac{1}{2} \ln|P| &= \frac{1}{2} \ln|B_{WL}| - \frac{1}{2} \ln|P_{WL}| \\ &= -\frac{1}{2} \ln|P_{WL}| \\ &= -\frac{1}{2} \ln|D| \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \ln(\delta_i^{-1}) \end{aligned}$$

lo cual permite calcular el incremento en la cantidad de información sólo a partir de los valores propios de la matriz de precisión del análisis.

Proposición: Se tiene que $\forall i \in \{1, \dots, \text{rg}(H)\} : 0 < \delta_i < 1$ y $\forall i \in \{\text{rg}(H) + 1, \dots, n\} : \delta_i = 1$.

Demostración: Se tiene que

$$\begin{aligned} P &= (B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1} \\ P &= (I_n + BH^t C^{-1} H)^{-1} B \\ WLPL^t W^t &= WL(I_n + BH^t C^{-1} H)^{-1} BL^t W^t \\ D &= WL(I_n + BH^t C^{-1} H)^{-1} (WL)^{-1} WLBL^t W^t \\ D &= WL(I_n + BH^t C^{-1} H)^{-1} (WL)^{-1} \\ D^{-1} &= WL(I_n + BH^t C^{-1} H) (WL)^{-1} \\ D^{-1} &= I_n + WLBH^t C^{-1} H (WL)^{-1} \end{aligned} \tag{2.16}$$

de donde se concluye que $WLBH^t C^{-1} H (WL)^{-1}$ es diagonal.

Además $WLBH^t C^{-1} H (WL)^{-1}$ es semidefinida positiva. En efecto, si consideramos la descomposición de Cholesky $C^{-1} = C^{-\frac{1}{2}} C^{-\frac{1}{2}}$, se tendrá que

$$WLBH^t C^{-1} H (WL)^{-1} = WLBH^t C^{-1} H (WL)^{-1}$$

$$\begin{aligned}
&= WLBL^tW^t(L^tW^t)^{-1}H^tC^{-\frac{1}{2}}C^{-\frac{t}{2}}H(WL)^{-1} \\
&= (WL)^{-t}H^tC^{-\frac{1}{2}}C^{-\frac{t}{2}}H(WL)^{-1} \\
&= (C^{-\frac{t}{2}}H(WL)^{-1})^tC^{-\frac{t}{2}}H(WL)^{-1} \geq 0
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Luego de (2.16) y (2.17) se tiene que $\forall i \in \{1, \dots, n\} : 0 \leq \delta_i \leq 1$.

Finalmente, dado que $C^{-\frac{1}{2}}$ y WL son a rango completo, se tendrá que

$$\text{rg}((C^{-\frac{t}{2}}H(WL)^{-1})^tC^{-\frac{t}{2}}H(WL)^{-1}) = \text{rg}(C^{-\frac{t}{2}}H(WL)^{-1}) = \text{rg}(H)$$

de donde se concluye que

$$\begin{aligned}
&\forall i \in \{1, \dots, \text{rg}(H)\} : 0 < \delta_i < 1 \\
&\forall i \in \{\text{rg}(H) + 1, \dots, n\} : \delta_i = 1
\end{aligned}$$

Por lo tanto, $\forall i \in \{\text{rg}(H) + 1, \dots, n\}$ el valor propio $\delta_i = 1$ tendrá asociado un aporte nulo al incremento de la cantidad de información. De la misma manera, $\forall i \in \{1, \dots, \text{rg}(H)\}$ un valor propio $\delta_i \ll 1$ tendrá asociado un aporte no nulo y significativo al incremento de la cantidad de información; y un valor propio $\delta_i \sim 1$ tendrá asociado un aporte no nulo, pero poco significativo, al incremento de la cantidad de información.

En el contexto de la teoría de la observación, para describir completamente el espacio de estados se requiere determinar n parámetros linealmente independientes, en base a la información a priori y a las observaciones disponibles. Tanto la escasez y/o redundancia de observaciones, como los errores asociados a las estimación a priori y a las observaciones, impiden determinar la totalidad de los n parámetros asociados al espacio de estados. Informalmente, los grados de libertad se definen como una medida del número de parámetros del espacio de estado que son determinables a pesar de éstas dificultades.

Lo anterior motiva definir los *grados de libertad* como

$$\text{gl} = n - \sum_{i=1}^n \delta_i \tag{2.18}$$

Dependiendo del contexto se puede considerar que los grados de libertad son función de la matriz de precisión del análisis $\text{gl} = \text{gl}(P^{-1})$ o bien son función de la matriz de sensibilidad $\text{gl} = \text{gl}(H)$. En lo que sigue de este trabajo se considerará esta última dependencia.

La definición de grados de libertad dada en (2.1) es independiente de la relación entre las dimensiones de la matriz H . Sin embargo hay dos interpretaciones posibles para los casos en que $m < n$ o $n < m$. En efecto

1. Si $m < n$ se tiene que

$$\text{gl}(H) = n - \sum_{i=1}^n \delta_i$$

$$\begin{aligned}
&= n - \sum_{i=m+1}^n \delta_i - \sum_{i=\text{rg}(H)+1}^m \delta_i - \sum_{i=1}^{\text{rg}(H)} \delta_i \\
&= n - (n - m) - (m - \text{rg}(H)) - \sum_{i=1}^{\text{rg}(H)} \delta_i
\end{aligned}$$

El término $n - m$ corresponde a número de parámetros no determinables por escasez de observaciones, el término $m - \text{rg}(H)$ corresponde al número de parámetros no determinables por redundancia en las observaciones y el término $\sum_{i=1}^{\text{rg}(H)} \delta_i$ es una medida del número de parámetros no determinables a causa del ruido propio del sistema.

2. Si $n < m$ se tiene que

$$\begin{aligned}
\text{gl}(H) &= n - \sum_{i=1}^n \delta_i \\
&= n - \sum_{i=\text{rg}(H)+1}^n \delta_i - \sum_{i=1}^{\text{rg}(H)} \delta_i \\
&= n - 0 - (n - \text{rg}(H)) - \sum_{i=1}^{\text{rg}(H)} \delta_i
\end{aligned}$$

El término 0 corresponde a número de parámetros no determinables por escasez de observaciones, el término $n - \text{rg}(H)$ corresponde al número de parámetros no determinables por redundancia en las observaciones y el término $\sum_{i=1}^{\text{rg}(H)} \delta_i$ es una medida del número de parámetros no determinables a causa del ruido propio del sistema.

Además, de los desarrollos anteriores se tiene que

$$\text{gl}(H) = n - \sum_{i=1}^n \delta_i = \min(n, m) - \sum_{i=1}^{\min(n, m)} \delta_i = \text{rg}(H) - \sum_{i=1}^{\text{rg}(H)} \delta_i$$

en donde la igualdad

$$\text{gl}(H) = \text{rg}(H) - \sum_{i=1}^{\text{rg}(H)} \delta_i$$

sugiere una estrecha relación entre los conceptos de grados de libertad y rango efectivo. De hecho, a continuación se probará que son, en un sentido a especificar, equivalentes:

Consideremos el caso particular en que $B = \sigma_b^2 I_n$ y $C = \sigma_o^2 I_m$. Denotando $\mu^2 = \frac{\sigma_o^2}{\sigma_b^2}$ y utilizando la descomposición en valores singulares de H se tendrá que

$$\begin{aligned} P &= (B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1} \\ P &= \left(\frac{1}{\sigma_b^2} I_n + \frac{1}{\sigma_o^2} H^t H \right)^{-1} \\ \frac{V^t}{\sigma_b} P \frac{V}{\sigma_b} &= \left(I_n + \frac{\Lambda^t \Lambda}{\mu^2} \right)^{-1} \end{aligned}$$

Entonces, si escogemos $L = \frac{V^t}{\sigma_b}$ se tendrá que $L B L^t = I_n$ y que

$$P_L = \left(I_n + \frac{\Lambda^t \Lambda}{\mu^2} \right)^{-1}$$

es diagonal y por lo tanto $W = I_n$. Luego se tienen las siguiente relaciones

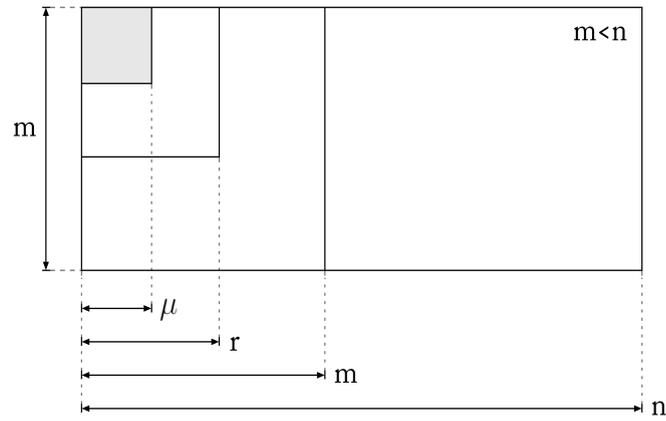
$$\forall i \in \{1, \dots, \text{rg}(H)\} : \delta_i = \frac{1}{1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}} \quad (2.19)$$

$$\forall i \in \{\text{rg}(H) + 1, \dots, n\} : \delta_i = 1 \quad (2.20)$$

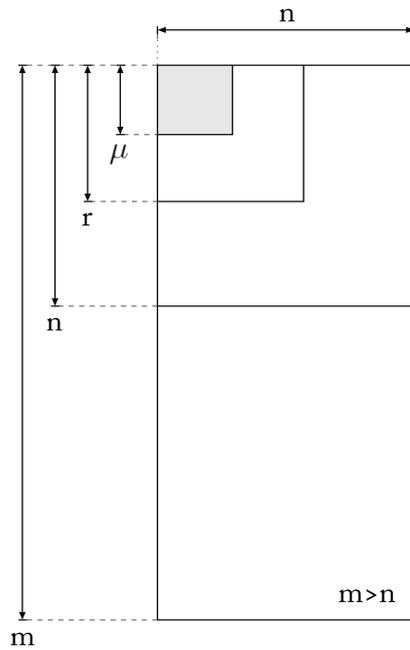
Notemos que

$$\forall i \in \{1, \dots, \text{rg}(H)\} : \lambda_i \ll \mu \Rightarrow \delta_i \sim 1 \quad \wedge \quad \lambda_i \gg \mu \Rightarrow \delta_i \sim 0$$

lo cual indica el sentido de la equivalencia entre los conceptos de grados de libertad y rango efectivo.



(a)



(b)

Figura 2.1: Esquema de la relación entre los grados de libertad y el factor Λ de la descomposición en valores singulares de la matriz de sensibilidad. En (a) caso $m < n$. En (b) caso $m > n$.

Matriz de Influencia y su relación con los Grados de Libertad

Se define la *matriz de influencia* -Fisher, 2003 [4]- como

$$A = C^{-\frac{t}{2}} H P H^t C^{-\frac{1}{2}}$$

Dado que $P = (B^{-1} + H^t C^{-1} H)^{-1}$, podemos considerar que la matriz de influencia es función de la matriz de sensibilidad $A = A(H)$.

Proposición: Los grados de libertad se pueden calcular a partir de la matriz de influencia

mediante la relación

$$\text{Tr}(A) = \text{gl}(H)$$

Demostración:

Recordemos que $(\delta_i)_{i=1}^n$ denotan al conjunto de valores propios de $P_L = LPL^t$. Dado que $B^{-1} = L^tL$, se tendrá que

$$\begin{aligned} P_L^{-1} &= L^{-t}(H^tC^{-1}H + L^tL)L^{-1} \\ &= L^{-t}H^tC^{-1}HL^{-1} + I_n \end{aligned}$$

Luego, considerando la diagonalización $L^{-t}H^tC^{-1}HL^{-1} = Z\Sigma Z^t$, con $Z = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$, se tendrá que

$$P_L^{-1} = Z(\Sigma + I_n)Z^t$$

con lo cual $\forall i \in \{1, \dots, n\} : \delta_i = \frac{1}{1 + \sigma_i}$.

Sea $A = C^{-\frac{t}{2}}HPH^tC^{-\frac{1}{2}}$ y notemos que $\text{rg}(A) = \text{rg}(H)$. Fijemos $j \in \{1, \dots, \text{rg}(H)\}$ y sea $y_j \neq 0$ un vector propio de A con valor propio asociado ν_j . Dado que $1 \leq j \leq \text{rg}(H)$ se tendrá que $\nu_j \neq 0$. Entonces, por definición se tendrá que

$$C^{-\frac{t}{2}}HPH^tC^{-\frac{1}{2}}y_j = \nu_j y_j \quad (2.21)$$

Consideremos el cambio de variables $x_j = L^{-t}H^tC^{-\frac{1}{2}}y_j$. Entonces, reemplazando en (2.21) se tendrá que

$$\begin{aligned} L^{-t}H^tC^{-1}HL^{-1}Px_j &= \nu_j x_j \\ Z\Sigma(\Sigma + I)^{-1}Z^t x_j &= \nu_j x_j \end{aligned}$$

Si $x_j = 0$ entonces $y_j \in \ker(A)$ y por lo tanto $\nu_j = 0$, lo cual es una contradicción. Luego, $x_j \neq 0$ es vector propio de $Z\Sigma(\Sigma + I)^{-1}Z^t$ con valor propio

$$\nu_j = \frac{\sigma_j}{1 + \sigma_j} = 1 - \delta_j$$

Por lo tanto, se tendrá que

$$\text{Tr}(A) = \sum_{j=1}^{\text{rg}(A)} \nu_j = \sum_{j=1}^{\text{rg}(H)} \nu_j = \sum_{j=1}^{\text{rg}(H)} (1 - \delta_i) = \text{rg}(H) - \sum_{j=1}^{\text{rg}(H)} \delta_i = \text{gl}(H)$$

2.3.3. Relaciones entre Precisión, Incremento de la Cantidad de Información y Grados de Libertad

Precisión como aproximación de primer orden del Incremento de la Cantidad de Información

Supongamos que $\forall i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i < \mu$. Entonces, mediante una expansión en serie de Taylor, se tendrá que

$$\ln \left(1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \left(\frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right)^k$$

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^r \ln \left(1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right) &= \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} + \sum_{i=1}^r \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \left(\frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right)^k \\ \sum_{i=1}^r \ln \left(1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right) &= \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} + \sum_{k=2}^{\infty} \sum_{i=1}^r \frac{(-1)^{k+1}}{k} \left(\frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right)^k\end{aligned}$$

Luego, utilizando la descomposición en valores singulares de H se prueba que $\forall l \in \mathbb{N}$

$$\text{Tr} \left(\left(\frac{H^t H}{\mu^2} \right)^l \right) = \sum_{i=1}^r \left(\frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right)^l$$

Entonces

$$\frac{1}{2} \ln \left| I_n + \frac{H^t H}{\mu^2} \right| = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\frac{H^t H}{\mu^2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \text{Tr} \left(\left(\frac{H^t H}{\mu^2} \right)^k \right) \quad (2.22)$$

De la relación (2.9) se tiene que la precisión es lineal afín a $\text{Tr} \left(\frac{H^t H}{\mu^2} \right)$. Por lo tanto, la precisión corresponde, salvo linealidad afín, a una aproximación de primer orden del incremento de la cantidad de información. Desgraciadamente, la hipótesis $\forall i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i < \mu$ bajo la cual esta relación es válida está asociada a condiciones muy desfavorable desde el punto de vista de la recuperabilidad.

Precisión como aproximación de primer orden de los Grados de Libertad

Supongamos que $\forall i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i < \mu$. Entonces, mediante una expansión en serie de Taylor y considerando la relación (2.19), se tendrá que

$$\begin{aligned}1 - \frac{1}{1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}} &= \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \left(\frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right)^k \\ \sum_{i=1}^r \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}} \right) &= \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} + \sum_{i=1}^r \sum_{k=2}^{\infty} (-1)^{k+1} \left(\frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right)^k \\ r - \sum_{i=1}^r \delta_i &= \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} + \sum_{k=2}^{\infty} \sum_{i=1}^r (-1)^{k+1} \left(\frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right)^k \\ \text{gl}(H) &= \text{Tr} \left(\frac{H^t H}{\mu^2} \right) + \sum_{k=2}^{\infty} (-1)^{k+1} \text{Tr} \left(\left(\frac{H^t H}{\mu^2} \right)^k \right) \quad (2.23)\end{aligned}$$

Por lo tanto, la precisión también corresponde, salvo linealidad afín, a una aproximación de primer orden de los grados de libertad. Desgraciadamente, como ya se mencionó, la hipótesis $\forall i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i < \mu$ bajo la cual esta relación es válida está asociada a condiciones muy desfavorable desde el punto de vista de la recuperabilidad.

Relación de desigualdad entre Precisión, Incremento de la Cantidad de Información y los Grados de Libertad

Se tiene que $\forall x > 0 : 1 - \frac{1}{x} \leq \ln(x) \leq x - 1$. Luego, $\forall i \in \{1, \dots, r\}$, se tendrá que

$$1 - \frac{1}{1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}} \leq \ln \left(1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right) \leq \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}$$

$$\sum_{i=1}^r (1 - \delta_i) \leq \sum_{i=1}^r \ln \left(1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right) \leq \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}$$

$$\text{gl}(H) \leq 2f_I(H) \leq \sigma_b^2 f_P(H) - 2n$$

De donde

$$\text{gl}(H) \leq 2f_I(H) < \sigma_b^2 f_P(H)$$

Nota: En lo que sigue nos referiremos a las funciones *precisión*, *incremento de la cantidad de información*, *rango*, *rango combinado*, *rango efectivo* y *grados de libertad* como *indicadores de la calidad del operador de observación*, notando que, intuitivamente, la calidad de un operador de observación aumenta a medida que aumentan los valores de cualquiera de estas funciones.

Nombre del indicador de calidad	Símbolo	Expresión matricial	Expresión SVD
Precisión	f_P	$\text{Tr}(P^{-1})$	$\frac{n}{\sigma_b^2} + \frac{1}{\sigma_b^2} \sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}$
Incremento en la Cantidad de Información	f_I	$\frac{1}{2} \ln BP^{-1} $	$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^r \left(1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \right)$
Rango Combinado	r_c		$\sum_{i=1}^r \frac{\lambda_i^2}{\mu^2 + \lambda_i^2}$
Rango Efectivo	r_e		$ i \in 1, \dots, r : \lambda_i \gg \mu $
Grados de Libertad	gl	$\text{Tr}(C^{-\frac{1}{2}} HPH^t C^{-\frac{1}{2}})$	$r - \sum_{i=1}^r \frac{1}{1 + \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}}$

Cuadro 2.1: Indicadores de la Calidad del Operador de Observación.

Capítulo 3

Aplicación a redes de monitoreo de calidad del aire

3.1. Construcción del operador de observación para el caso de una red de monitoreo de calidad del aire

En lo que sigue se ha optado por separar espacial y temporalmente los espacios de emisión y de observación, ya que los códigos Matlab utilizados en las aplicaciones de este trabajo consideran esta separación. Luego, este capítulo no sólo particulariza la Teoría de la Observación a redes de Calidad del Aire sino que también facilita la lectura y comprensión de los códigos Matlab asociados. Dado que la notación se complejiza, se sugiere consultar el Glosario en el Apéndice D.

De acuerdo a la notación introducida en el Apéndice A, denotemos por $\vec{\Omega}$ al vector velocidad angular terrestre, por ρ al campo de densidad del aire seco, por P al campo de presión del aire seco, por T_d al campo de temperatura del aire seco, por q a la concentración de agua y por \vec{V} al campo tridimensional de velocidad del viento relativa al movimiento de rotación terrestre dado por $\vec{\Omega}$. Consideremos finalmente una especie contaminante con concentración c y emisión e .

Sea $T > 0$ y sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^2 . Planteemos en $\Omega \times (0, T)$ el sistema de EDPs asociado a las Ecuaciones de la Meteorología y a la Ecuación de la Dispersión, y supongamos que existen y que se satisfacen todas las hipótesis necesarias -sobre condiciones iniciales, condiciones de borde, dominio, parámetros, lados derechos, características de los operadores diferenciales asociados, etc.- para que el sistema posea solución c, ρ, P, T_d, q y \vec{V} única definida en $\Omega \times (0, T)$.

Consideremos la siguiente notación para la discretización asociada al modelo numérico, ON-LINE u OFF-LINE, que permite resolver el sistema.

Sea $\mathcal{D}_T = \{t_1, \dots, t_{N_T}\} \subset [0, T]$ una *discretización temporal* de tamaño $N_T \in \mathbb{N}$. Sea $\mathcal{D}_E = \{(x_1, y_1), \dots, (x_{N_E}, y_{N_E})\} \subset \bar{\Omega}$ una *discretización espacial* de tamaño $N_E \in \mathbb{N}$.

Sea $\mathcal{E}_T = \{t_1^e, \dots, t_{N_T^e}^e\} \subseteq \mathcal{D}_T$ un conjunto de *instantes de emisión* de tamaño $N_T^e \in \mathbb{N}$.
 Sea $\mathcal{E}_E = \{(x_1^e, y_1^e), \dots, (x_{N_E^e}^e, y_{N_E^e}^e)\} \subseteq \mathcal{D}_E$ un conjunto de *puntos de emisión* de tamaño $N_E^e \in \mathbb{N}$.

Sea $\mathcal{O}_T = \{t_1^o, \dots, t_{N_T^o}^o\} \subseteq \mathcal{D}_T$ un conjunto de *instantes de observación* de tamaño $N_T^o \in \mathbb{N}$.
 Sea $\mathcal{O}_E = \{(x_1^o, y_1^o), \dots, (x_{N_E^o}^o, y_{N_E^o}^o)\} \subseteq \mathcal{D}_E$ un conjunto de *puntos de observación* de tamaño $N_E^o \in \mathbb{N}$.

Definamos el siguiente operador de observación

$$\begin{aligned} \mathcal{H} : \mathbb{R}^{N_E^e N_T^e} &\longrightarrow \mathbb{R}^{N_E^o N_T^o} \\ e &\longmapsto \mathcal{H}(e) = (c(x_1^o, y_1^o, t_1^o), \dots, c(x_1^o, y_1^o, t_{N_T^o}^o), \dots, c(x_{N_E^o}^o, y_{N_E^o}^o, t_1^o), \dots, c(x_{N_E^o}^o, y_{N_E^o}^o, t_{N_T^o}^o)) \end{aligned} \quad (3.1)$$

el cual toma una emisión $e \in \mathbb{R}^{N_E^e N_T^e}$, la extiende por cero a \tilde{e} desde la grilla de emisión $\mathcal{E}_E \times \mathcal{E}_T$ a la grilla $\mathcal{D}_E \times \mathcal{D}_T$, resuelve el sistema de EDPs con \tilde{e} como parámetro de emisión y evalúa la concentración c en $\mathcal{O}_E \times \mathcal{O}_T$.

Ordenaremos las emisiones en (3.1) de la siguiente manera

$$(e(x_1^e, y_1^e, t_1^e), \dots, e(x_1^e, y_1^e, t_{N_T^e}^e), \dots, c(x_{N_E^e}^e, y_{N_E^e}^e, t_1^e), \dots, c(x_{N_E^e}^e, y_{N_E^e}^e, t_{N_T^e}^e)) \quad (3.2)$$

Nota: Según la notación utilizada en la sección anterior, $\mathbb{R}^{N_E^e N_T^e}$ corresponde al *espacio de estados* \mathbb{R}^n y $\mathbb{R}^{N_E^o N_T^o}$ corresponde al *espacio de observaciones* \mathbb{R}^m .

Las emisiones antropogénicas e corresponden a los *vectores de estado* y la concentración c de la especie contaminante (obtenida a partir de un modelo de dispersión) corresponde a la observación de estas emisiones.

Por lo tanto, para una emisión en principio desconocida e_t (de la cual sólo se tiene una estimación a priori e_b y una medición empírica de la concentración c_o) la metodología descrita en la sección anterior permitirá obtener una estimación a posteriori e_a en base a la información que aporta la estimación a priori e_b (que de ahora en adelante llamaremos *inventario de emisiones*) y la observación c_o .

3.2. Estructura y cálculo del operador de observación linealizado

Consideremos, según las definiciones de la sección anterior, los puntos e instantes de emisión dados por $\mathcal{E}_E \times \mathcal{E}_T$ y los puntos e instantes de observación dados por $\mathcal{O}_E \times \mathcal{O}_T$.

Fijemos una emisión e_t . Sean e_b y c_o el inventario de emisiones asociado a e_t y la observación empírica de e_t , respectivamente.

Consideremos la linealización del operador de observación \mathcal{H} en torno al inventario de emisiones

$$\mathcal{H}(e) \approx \mathcal{H}(e_b) + H(e - e_b) \quad (3.3)$$

con e en una vecindad apropiada V de e_b y con $H \in \mathcal{M}_{N_E^o N_T^o \times N_E^e N_T^e}$ la matriz de sensibilidad asociada.

Sean los índices $i \in \{1, \dots, N_E^e\}$, $j \in \{1, \dots, N_T^e\}$, $k \in \{1, \dots, N_E^o\}$ y $l \in \{1, \dots, N_T^o\}$. Denotemos por $h_{kl}^{ij} \in \mathbb{R}$ a la concentración en el punto de observación $(x_k^o, y_k^o) \in \mathcal{O}_E$ y en el instante de observación $t_l^o \in \mathcal{O}_T$, obtenida a partir de la dispersión de una emisión unitaria en el punto de emisión $(x_i^e, y_i^e) \in \mathcal{E}_E$ y en el instante de emisión $t_j^e \in \mathcal{E}_T$.

Sea $F_k(H) \in \mathcal{M}_{N_T^o \times N_E^e N_T^e}$ la matriz definida por

$$\left(\begin{array}{cccccccccccc} h_{k1}^{11} & \cdots & h_{k1}^{1j} & \cdots & h_{k1}^{1N_T^e} & \cdots & h_{k1}^{i1} & \cdots & h_{k1}^{ij} & \cdots & h_{k1}^{iN_T^e} & \cdots & h_{k1}^{N_E^e 1} & \cdots & h_{k1}^{N_E^e j} & \cdots & h_{k1}^{N_E^e N_T^e} \\ \vdots & & \vdots \\ h_{kl}^{11} & \cdots & h_{kl}^{1j} & \cdots & h_{kl}^{1N_T^e} & \cdots & h_{kl}^{i1} & \cdots & h_{kl}^{ij} & \cdots & h_{kl}^{iN_T^e} & \cdots & h_{kl}^{N_E^e 1} & \cdots & h_{kl}^{N_E^e j} & \cdots & h_{kl}^{N_E^e N_T^e} \\ \vdots & & \vdots \\ h_{kN_T^o}^{11} & \cdots & h_{kN_T^o}^{1j} & \cdots & h_{kN_T^o}^{1N_T^e} & \cdots & h_{kN_T^o}^{i1} & \cdots & h_{kN_T^o}^{ij} & \cdots & h_{kN_T^o}^{iN_T^e} & \cdots & h_{kN_T^o}^{N_E^e 1} & \cdots & h_{kN_T^o}^{N_E^e j} & \cdots & h_{kN_T^o}^{N_E^e N_T^e} \end{array} \right)$$

la cual denominaremos *k-bloque-fila de observación de H*. Entonces, H se construye por bloques-fila a partir de las matrices $F_1(H), \dots, F_{N_E^o}(H)$ de la siguiente forma

$$H = \begin{pmatrix} F_1(H) \\ \vdots \\ F_{N_E^o}(H) \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

El cálculo de los coeficientes h_{kl}^{ij} se puede realizar a partir del siguiente procedimiento, llamado *método directo*:

Sea $c^{ij} : \Omega \times (0, T) \mapsto \mathbb{R}$ la solución de la Ecuación de la Dispersión en la forma (A.10)

$$\partial_t c^{ij} - \Delta c^{ij} + \vec{V} \cdot \nabla c^{ij} = e^{ij} \quad (3.5)$$

en donde $e^{ij} : \Omega \times (0, T) \mapsto \mathbb{R}$ corresponde a una emisión unitaria en el punto de emisión $(x_i^e, y_i^e) \in \mathcal{E}_E$ y en el instante de emisión $t_j^e \in \mathcal{E}_T$. Luego, dado un punto de observación $(x_k^o, y_k^o) \in \mathcal{O}_E$ y un instante de observación $t_l^o \in \mathcal{O}_T$ se tendrá por definición que

$$h_{kl}^{ij} = c^{ij}(x_k^o, y_k^o, t_l^o) := c_{kl}^{ij} \quad (3.6)$$

Esta manera de calcular H requiere de $N_E^e \times N_T^e$ resoluciones del sistema de EDPs y construye a la matriz H por columnas.

Nota: El cálculo de las matrices de sensibilidad utilizadas en este trabajo se realizó en base al método directo. Sin embargo, existe un procedimiento alternativo para el cálculo de los coeficientes h_{kl}^{ij} , llamado *método adjunto*. Para mayores detalles de éste método referirse a Saide et al., 2011 [28].

Operador de observación total y red de monitoreo

Si $\mathcal{O}_E = \mathcal{D}_E$ diremos que el operador de observación \mathcal{H} es de *observación total*. Si $\mathcal{O}_E \subset \mathcal{D}_E$ diremos que el operador de observación \mathcal{H} es de *observación parcial* y nos referiremos a \mathcal{O}_E como *red de monitoreo de tamaño* N_E^o .

Para el caso particular de un operador de observación total, será útil adoptar la siguiente notación: $\hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H}$ y $\hat{H} = H$. En general el símbolo $\hat{\cdot}$ se asociará a la observación de total del espacio de observación.

Para el caso particular de redes de monitoreo, será útil adoptar la siguiente notación: $N = N_E^o$, $R = \mathcal{O}_E$, $\mathcal{H}_R = \mathcal{H}$ y $H_R = H$.

Esta distinción entre la observación total y parcial de la grilla de observación se debe a que los códigos Matlab asociados a la aplicaciones de este trabajo construyen las matrices de sensibilidad de redes de monitoreo particulares a partir de *sólo una* matriz de sensibilidad asociada a toda la grilla de observación (ver figura 3.1).

Consideremos el operador de observación total $\hat{\mathcal{H}}$. Definamos, para $N \in \mathbb{N}$ con $N < N_E$, el conjunto

$$BF_N(\hat{H}) = \left\{ H \in \mathcal{M}_{NN_T^o \times N_E^e N_T^e} : H = \begin{pmatrix} F_{k_1}(\hat{H}) \\ \vdots \\ F_{k_N}(\hat{H}) \end{pmatrix} \text{ tal que } \forall s \in \{1, \dots, N\} : k_s \in \{1, \dots, N_E\}, \right. \\ \left. (k_s)_s \text{ estrictamente monótona creciente en } s, F_{k_s}(\hat{H}) \text{ } k_s\text{-bloque-fila de observación de } \hat{H} \right\} \quad (3.7)$$

Entonces se tendrá que:

1. Para toda red de monitoreo R de tamaño N : $H_R \in BF_N(\hat{H})$.
2. Para todo $H \in BF_N(\hat{H})$ existe una red de monitoreo R tal que $H_R = H$.

Esto quiere decir que toda red de monitoreo se puede identificar con una submatriz apropiada de \hat{H} , o bien que $BF_N(\hat{H})$ es el conjunto de todas las matrices de sensibilidad H_R asociadas a las redes de monitoreo R de tamaño N .

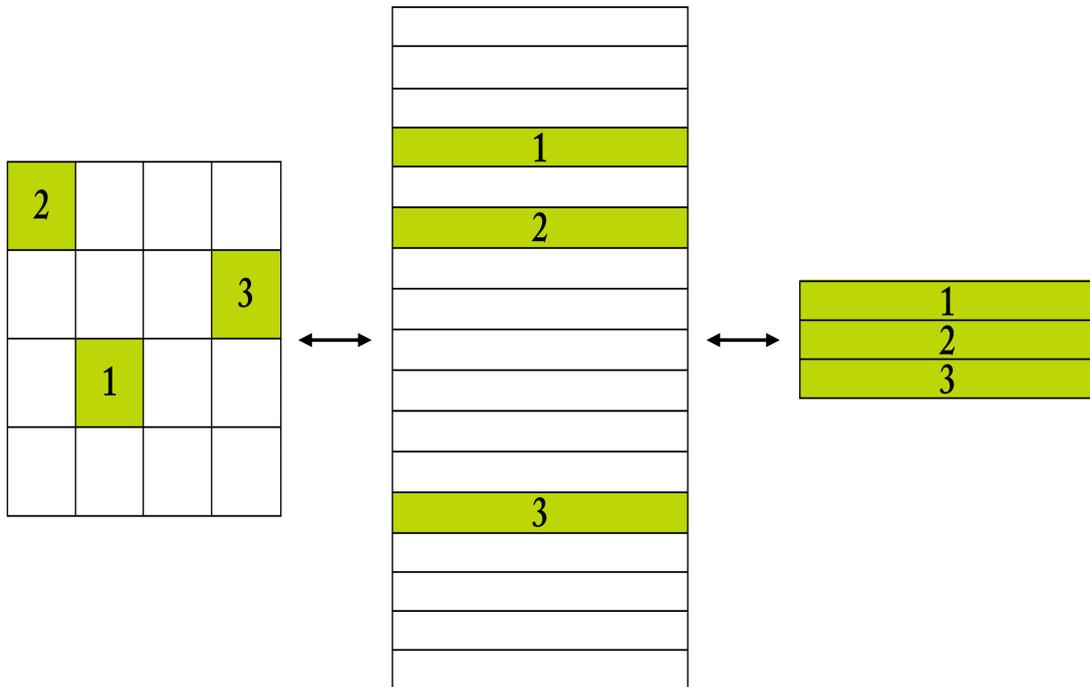


Figura 3.1: Esquema de la relación entre una red de monitoreo y su matriz de sensibilidad, entendida como submatriz, por filas, de \hat{H} .

Nota: Finalmente, para el caso de redes de monitoreo, un *indicador de la calidad del operador de observación* se denominará simplemente *indicador de la calidad de la red*.

3.3. Criterios de diseño de redes de monitoreo ambiental

3.3.1. Criterios de diseño basados en los conjuntos de emisión y/o observación

Ponderación de los puntos de emisión y/o observación

Todo criterio de diseño de una red de monitoreo basado sólo en la calidad de la red, dependerá exclusivamente de:

1. H_R : La sensibilidad del modelo de dispersión frente a perturbaciones de las emisiones.
2. μ : La relación entre la precisión asociada a la construcción del inventario de emisiones y la precisión con la cual se observa la concentración.

Sin embargo podría ser de interés incorporar otro tipo de consideraciones con respecto a la ubicación de los puntos de monitoreo de una red.

Por ejemplo, en la práctica podría darse que ciertos puntos de observación presenten

dificultades considerables para efectivamente instalar una estación de monitoreo (como altos costos de construcción derivados de condiciones geográficas y/o socio-económicas propias del lugar). O bien que, por razones médicas, se desee instalar una estación de monitoreo cercana a puntos de emisión con alta exposición de la población.

Con esta idea en mente, fijemos $\gamma = (\gamma_i)_i \in \mathbb{R}^{N_E N_T}$, ordenado según (3.1), y $\pi = (\pi_i)_i \in \mathbb{R}^{N_E^e N_T^e}$, ordenado según (3.2).

Definamos, para $\alpha \geq 0$ y $\beta \geq 0$

$$\begin{aligned}\Gamma_\alpha &= \text{diag} (\sqrt{\gamma_1^\alpha}, \dots, \sqrt{\gamma_{N_E N_T}^\alpha}) \\ \Pi_\beta &= \text{diag} (\sqrt{\pi_1^\beta}, \dots, \sqrt{\pi_{N_E^e N_T^e}^\beta}) \\ \widehat{H}_{\alpha\beta} &= \Gamma_\alpha \widehat{H} \Pi_\beta\end{aligned}$$

De esta forma, como Γ_α premultiplica a \widehat{H} , se tendrá que el i -ésimo elemento de la grilla $\mathcal{D}_E \times \mathcal{D}_T$, entendida como conjunto de observación, tiene asociado un peso $\sqrt{\gamma_i^\alpha}$. Análogamente, como Π_β postmultiplica a \widehat{H} , se tendrá que el j -ésimo elemento de $\mathcal{E}_E \times \mathcal{E}_T$ tiene asociado un peso $\sqrt{\pi_j^\beta}$.

Entonces, para considerar estos pesos en los criterios de diseño de una red de tamaño N , bastará trabajar en el conjunto de matrices de sensibilidad ponderada $BF_N(\widehat{H}_{\alpha\beta})$.

Mapa de precisión

Para una red de monitoreo R de tamaño N , si $B = \sigma_b I_{N_E^e N_T^e}$ y $C = \sigma_o I_{N_E^o N_T^o}$, se tiene que la precisión del análisis $P^{-1} = \frac{1}{\sigma_b} I_{N_E^e N_T^e} + \frac{1}{\sigma_o} H_R^t H_R$ es lineal afín a $H_R^t H_R$.

Definamos la función

$$\begin{aligned}\varphi : \mathcal{E}_E \times \mathcal{E}_T &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (x_i^e, y_i^e, t_j^e) &\longmapsto \varphi(x_i^e, y_i^e, t_j^e) = (H_R^t H_R)_{n_{ij} n_{ij}}\end{aligned}$$

en donde n_{ij} denota la posición a lo largo de la diagonal de $H_R^t H_R$ correspondiente al i -ésimo punto de emisión y al j -ésimo instante de emisión. Para el ordenamiento de la grilla de emisión dado en (3.2) se tiene que $n_{ij} = (i-1)N_T^e + j$.

El gráfico de esta función, que denominaremos *mapa de precisión*, permite estudiar la precisión con la cual toda la grilla de observación observa a una emisión unitaria emitida en un punto específico de la grilla de emisiones.

Si $\xi_{n_{ij}}$ denota el n_{ij} -ésimo vector canónico del espacio de emisiones $\mathbb{R}^{N_E^e N_T^e}$, se tiene que

$$(H_R^t H_R)_{n_{ij} n_{ij}} = \|(H_R)_{\bullet n_{ij}}\|_2^2 = \|H_R \xi_{n_{ij}}\|_2^2$$

y por lo tanto

$$(H_R^t H_R)_{n_{ij} n_{ij}} = 0 \Rightarrow \|H_R \xi_{n_{ij}}\| = 0 \Rightarrow \xi_{n_{ij}} \in \ker(H_R)$$

es decir, los valores nulos del mapa de precisión están asociados a puntos de la grilla de emisión en donde una emisión unitaria no es recuperable a partir de las observaciones.

3.3.2. Criterios de extensión y reducción de redes de monitoreo ambiental

Incorporación de un punto de observación

Sea f un indicador de la calidad de una red de monitoreo R de tamaño N . Para f , R y N fijos, la función

$$\begin{aligned} \varphi : \mathcal{D}_E \setminus R &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (x, y) &\longmapsto \varphi(x, y) = f(H_{R \cup \{(x, y)\}}) - f(H_R) \end{aligned}$$

permite estudiar el aumento de la calidad de la red cuando se incorpora un nuevo punto de observación. El gráfico de esta función, que por su importancia en las aplicaciones denominaremos *mapa de aumento de la calidad*, permite visualizar cuales regiones del dominio deben ser observadas para obtener un aumento significativo en la calidad de la red.

En particular, el problema

$$\max_{(x, y) \in \mathcal{D}_E \setminus R} f(H_{R \cup \{(x, y)\}}) - f(H_R) \quad (3.8)$$

permite determinar el punto de red que debe incorporarse para que el aumento de la calidad de la red sea máximo.

Tanto el cálculo de los valores de φ como la resolución *a fuerza bruta* de (3.8), requieren de $|\mathcal{D}_E \setminus R|$ evaluaciones del indicador de la calidad f .

Eliminación de un punto observación

Sea f un indicador de la calidad de una red de monitoreo R de tamaño N . Para f , R y N fijos, la función

$$\begin{aligned} \varphi : R &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (x, y) &\longmapsto \varphi(x, y) = f(H_R) - f(H_{R \setminus \{(x, y)\}}) \end{aligned}$$

permite estudiar la disminución de la calidad de la red cuando se elimina alguno de sus puntos de observación. Nos referiremos al gráfico de esta función como *mapa de disminución de la calidad*.

En particular, el problema

$$\min_{(x, y) \in R} f(H_R) - f(H_{R \setminus \{(x, y)\}}) \quad (3.9)$$

permite determinar el punto de red que debe eliminarse para que la disminución de la calidad de la red sea mínima.

Tanto el cálculo de los valores de φ como la resolución *a fuerza bruta* de (3.9), requieren de $|R|$ evaluaciones del indicador de la calidad f .

3.3.3. Criterios de diseño óptimo de una red de monitoreo de calidad del aire

Óptimo respecto de la dispersión geométrica de la red

Sea d una distancia en \mathbb{R}^2 y sea R una red de monitoreo de tamaño N . Consideremos el siguiente indicador de la separación mínima entre los puntos que conforman una red de monitoreo

$$D(H_R) = \min_{\substack{(x_1, y_1), (x_2, y_2) \in R \\ (x_1, y_1) \neq (x_2, y_2)}} d((x_1, y_1), (x_2, y_2))$$

Luego, para N fijo, el problema de maximización

$$\max_{H_R \in BF_N(\hat{H})} D(H_R) \quad (3.10)$$

permite obtener una red de monitoreo óptima, que denominaremos *red MAX-MIN*, con máxima dispersión geométrica en \mathcal{O}_E .

Dicha red es un referente de red equiespaciada sobre todo el dominio espacial de observación y en la práctica constituye una interesante condición inicial para los algoritmos de diseño óptimo que se verán a continuación.

Óptimo respecto de la calidad de la red

Sea f un indicador de la calidad de una red de monitoreo R de tamaño N . Para f y N fijos, interesa resolver el problema de maximización

$$\max_{H_R \in BF_N(\hat{H})} f(H_R) \quad (3.11)$$

La resolución *a fuerza bruta* de los problemas (3.10) o (3.11) requiere de $\binom{N_E}{N}$ evaluaciones del indicador de la calidad f , lo cual típicamente es de un orden significativamente mayor que las requeridas en los casos de incorporación y eliminación de un punto de red. Esto hace necesario abordar el problema de diseño óptimo en base a técnicas de optimización específicas, que tomen en cuenta la naturaleza discreta del conjunto factible asociado.

Nota: Consideremos el caso particular en que el indicador de la calidad corresponde a los grados de libertad.

Sea una red de monitoreo R de tamaño N y matriz de sensibilidad H_R . De acuerdo a lo expuesto en la sección 2.3.2, sea $A(H_R)$ la matriz de influencia asociada, de valores propios $\nu_1(H_R), \dots, \nu_{NN_T^o}(H_R)$. Entonces se tendrá que

$$\max_{H_R \in BF_N(\hat{H})} \text{gl}(H_R) = \max_{H_R \in BF_N(\hat{H})} \text{Tr}(A(H_R)) = \max_{H_R \in BF_N(\hat{H})} \sum_{j=1}^{NN_T^o} \nu_j(H_R) \quad (3.12)$$

Por otro lado, para $m \in \mathbb{N}$ y $\rho > 0$, el problema en \mathbb{R}^m

$$\max_{\|y\|_2 \leq \rho} \sum_{j=1}^m y_j$$

tiene por solución a $y^* = \left(\frac{\rho}{\sqrt{m}}, \dots, \frac{\rho}{\sqrt{m}} \right)$.

Entonces, si bien el conjunto de valores propios

$$\{(\nu_1(H_R), \dots, \nu_{NN_T^2}(H_R)) \in \mathbb{R}^{NN_T^2}, \text{ con } H_R \in BF_N(\hat{H})\}$$

no tiene por que estar contenido en la frontera de alguna bola apropiada, la similitud de los valores propios de la matriz de influencia $\nu_1(H_R), \dots, \nu_{NN_T^2}(H_R)$ puede entregar una noción de que tan próximo se está del óptimo en (3.12).

Método heurístico de minimización estocástica Recocido Simulado

La resolución del problema de maximización asociado al diseño óptimo de redes tiene dos grandes dificultades: su conjunto factible es discreto y la evaluación directa de todos los posibles valores de su función objetivo requiere de un gran tiempo de cómputo. Por estas razones, se ha utilizado un algoritmo heurístico de optimización, llamado Recocido Simulado (Simulated Annealing, S.A), el cual permite obtener soluciones cercanas al óptimo en tiempos de cómputo razonables.

En cada iteración, el algoritmo Recocido Simulado considera un punto factible y decide probabilísticamente entre moverse hacia otro punto factible cercano o mantenerse en el punto factible actual. La movilidad de esta búsqueda depende de un parámetro global T , llamado *temperatura*. Inicialmente el algoritmo utiliza valores grandes de T , permitiendo que la búsqueda del óptimo sea prácticamente aleatoria. Luego, en la medida en que el algoritmo es capaz de disminuir estocásticamente el valor de la función objetivo, los valores de T disminuyen, restringiendo la movilidad de la búsqueda hacia lo que se espera que sea un punto factible cercano al óptimo.

Concretamente, fijemos un indicador de la calidad f . Dado que el algoritmo Recocido Simulado utilizado en este trabajo se encuentra programado como un algoritmo de minimización, la función objetivo del problema a resolver es $g = -f$. Sea una red R y sea R_{test} una red test obtenida mediante una perturbación apropiada de R .

Para $\delta = g(H_{R_{test}}) - g(H_R)$ se define la probabilidad p de moverse desde la red actual R a la red test R_{test} como

$$p = \begin{cases} 1 & \text{si } \delta \geq 0 \\ \exp\left\{-\frac{\delta}{T}\right\} & \text{si } \delta < 0 \end{cases}$$

A partir de p y de un valor aleatorio fijo y uniformemente distribuido $p_a \sim \mathcal{U}(0, 1)$, hay 3 posibilidades

1. Si $\delta \geq 0$ entonces el algoritmo se mueve de la red R a la red R_{test} , disminuyendo el valor de la función objetivo.
2. Si $\delta < 0 \wedge p > p_a$ entonces el algoritmo se mueve de la red R a la red R_{test} , sin disminuir el valor de la función objetivo.
3. Si $\delta < 0 \wedge p \leq p_a$ entonces el algoritmo no se mueve, manteniéndose en la red R .

Mientras que la alternativa 1 conduce hacia una disminución de la función objetivo, la alternativa 2 permite posicionar al algoritmo sobre redes que, en futuras iteraciones, podrían conducir a una disminución de la función objetivo. Tal movilidad aleatoria pretende evitar que el algoritmo itere alrededor de mínimos locales.

Diremos que el algoritmo es monótono en la temperatura si ésta disminuye en cada iteración. En caso contrario, diremos que el algoritmo es no monótono en la temperatura, pudiendo ésta disminuir o aumentar dependiendo del valor de ciertos parámetros internos que miden el desempeño que ha tenido el algoritmo hasta ese momento. Si T disminuye (aumenta), entonces p disminuye (aumenta), haciendo más factible, en un sentido probabilista, la alternativa 3 (2). Por esta razón, la disminución (aumento) de la temperatura se asocia a una rigidización (ampliación) de la búsqueda del algoritmo.

La eventual existencia de mínimos locales hace que la solución final del algoritmo dependa tanto de la red inicial como de los parámetros de rigidización del movimiento. Más aún, para una red inicial fija, la naturaleza estocástica del algoritmo hace que 2 soluciones finales no tengan por que ser iguales.

Para una red inicial fija, una correcta representación de la solución final del algoritmo estaría dada por una función de distribución empírica de probabilidad de las soluciones finales, construida a partir de numerosas ejecuciones del algoritmo. Desgraciadamente, esto puede generar problemas de tiempo de cómputo.

Fijemos un tamaño de red N . Sea $M \in \mathbb{N}$ y sean $\{R_1, \dots, R_M\} \subset \mathcal{P}_N(\mathcal{O}_E)$ soluciones finales del algoritmo Recocido Simulado, todas obtenidas a partir de la misma red inicial. Entonces, la función de distribución empírica de probabilidad de las soluciones finales está dada por

$$\begin{aligned} \varphi : \mathcal{O}_E &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (x^e, y^e) &\longmapsto \varphi(x^e, y^e) = \frac{1}{NM} |\{k \in \{1, \dots, M\} : (x^e, y^e) \in R_k\}| \end{aligned}$$

Existe una serie de otros parámetros que regulan el desempeño del algoritmo Recocido Simulado. Un pseudocódigo del algoritmo Recocido Simulado puede encontrarse en el Apéndice C. Para mayor detalles de este tipo de algoritmos se sugiere consultar Kirkpatrick, 1983 [18].

3.3.4. Relajación del problema de red óptima para el caso del incremento de la cantidad de información

Reformulación del problema discreto

Fijemos un tamaño de red N y consideremos el problema de diseño óptimo con criterio de cantidad de información

$$\max_{H_R \in BF_N(\widehat{H})} \ln |\mu^2 I_{N_E^e N_T^e} + H_R^t H_R| \quad (3.13)$$

Reformulemos este problema de la siguiente manera:

Para $n_0 \in \mathbb{N}$ denotemos $1_{n_0} = (1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^{n_0}$ y $0_{n_0} = (0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{n_0}$.

Sea $H_R \in BF_N(\widehat{H})$. Entonces H_R estará compuesta por N bloques-fila de observación F_{k_1}, \dots, F_{k_N} .

Sea $g^R = (g_k^R)_k \in \{0, 1\}^{N_E}$ el vector definido por

$$g_k^R = 1_{\{k_1, \dots, k_N\}}(k) = \begin{cases} 1 & \text{si } k \in \{k_1, \dots, k_N\} \\ 0 & \text{si } k \notin \{k_1, \dots, k_N\} \end{cases} \quad (3.14)$$

que denominaremos *indicatriz de la red R*.

Extendamos g^R a $\tilde{g}^R \in \{0, 1\}^{N_E N_T^o}$ de la siguiente manera:

Para $k \in \{1, \dots, N_E\}$, sea $\tilde{g}_k^R \in \mathbb{R}^{N_T^o}$ el vector definido por

$$\tilde{g}_k^R = \begin{cases} 1_{N_T^o} & \text{si } k \in \{k_1, \dots, k_N\} \\ 0_{N_T^o} & \text{si } k \notin \{k_1, \dots, k_N\} \end{cases} \quad (3.15)$$

y sea

$$\tilde{g}^R = (\tilde{g}_1^R, \dots, \tilde{g}_{N_E}^R) \quad (3.16)$$

Notemos que $\tilde{g}^R = K g^R$, con $K \in \mathcal{M}_{N_E N_T^o \times N_E}$ definida por

$$\begin{pmatrix} 1_{N_T^o} & 0_{N_T^o} & \cdots & 0_{N_T^o} & 0_{N_T^o} \\ 0_{N_T^o} & 1_{N_T^o} & \cdots & 0_{N_T^o} & 0_{N_T^o} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0_{N_T^o} & 0_{N_T^o} & \cdots & 1_{N_T^o} & 0_{N_T^o} \\ 0_{N_T^o} & 0_{N_T^o} & \cdots & 0_{N_T^o} & 1_{N_T^o} \end{pmatrix}$$

Denotemos $G^R = \text{diag}(K g^R)$.

Finalmente, notemos que

$$(G^R \widehat{H})^t G^R \widehat{H} = H_R^t H_R \quad (3.17)$$

En efecto

$$\begin{aligned} ((G^R \hat{H})^t G^R \hat{H})_{ij} &= \sum_{k=1}^N (G^R \hat{H})_{ik}^t (G^R \hat{H})_{kj} = \sum_{k=1}^N (G^R \hat{H})_{ki} (G^R \hat{H})_{kj} \\ &= \sum_{k=1}^N \tilde{g}_k^R \hat{H}_{ki} \tilde{g}_k^R \hat{H}_{kj} = \sum_{k: \tilde{g}_k^R=1} \hat{H}_{ki} \hat{H}_{kj} = (H_R^t H_R)_{ij} \end{aligned}$$

Esta relación será fundamental para la extensión del problema (3.13).

Si $B_N = \{g \in \mathbb{R}^{N_E} : \|g\|_1 = N\}$, entonces el conjunto de todas la indicatrices de redes de tamaño N coincide con $B_N \cap \{0, 1\}^{N_E}$. Es decir, tomar $H_R \in BF_N(\hat{H})$ es equivalente a tomar $g^R \in B_N \cap \{0, 1\}^{N_E}$.

Entonces el problema (3.13) puede reformularse como

$$\max_{g^R \in B_N \cap \{0, 1\}^{N_E}} \ln |\mu^2 I_{N_E^e N_T^e} + (G^R \hat{H})^t G^R \hat{H}| \quad (3.18)$$

Relajación del problema discreto

La formulación continua del problema (3.18) se basa en la posibilidad de levantar la restricción $\{0, 1\}^{N_E}$ del conjunto factible $B_N \cap \{0, 1\}^{N_E}$.

Consideremos el problema continuo de optimización

$$\max_{g \in B_N \cap (\mathbb{R}_+ \cup \{0\})^{N_E}} \ln |\mu^2 I_{N_E^e N_T^e} + (G \hat{H})^t G \hat{H}| \quad (3.19)$$

con $G = \text{diag}(Kg)$.

De la relación (3.17) se tiene que el problema continuo (3.19) corresponde a una relajación del problema discreto (3.18), y por lo tanto del problema discreto original (3.13).

Por lo tanto, si los óptimos del problema (3.19) se encuentran en $B_N \cap \{0, 1\}^{N_E} \subset B_N \cap (\mathbb{R}_+ \cup \{0\})^{N_E}$, entonces es posible resolver el problema (3.18) mediante la aplicación de técnicas de optimización continua al problema (3.19). Sin embargo, no hay condiciones que aseguren la existencia de óptimos de (3.19) en $B_N \cap \{0, 1\}^{N_E}$.

Una alternativa heurística para obtener óptimos en $B_N \cap \{0, 1\}^{N_E}$ consiste en penalizar la función objetivo en (3.19) con $\|\cdot\|_p$ para $p \leq 1$. Es decir, para $\eta > 0$, consideraremos el problema penalizado

$$\max_{g \in B_N \cap (\mathbb{R}_+ \cup \{0\})^{N_E}} \ln |\mu^2 I_{N_E^e N_T^e} + (G \hat{H})^t G \hat{H}| + \eta \|g\|_p \quad (3.20)$$

Nota: En virtud de la relación (3.17), este procedimiento de relajación es aplicable a todo indicador de la calidad f que, dado $N \in \mathbb{N}$, verifique

$$\forall H_R \in BF_N(\hat{H}) : f(H_R) = g(H_R^t H_R)$$

para una función g apropiada. Tal es el caso de la precisión, de los grados de libertad y del rango efectivo.

Factibilidad de la aplicación de un método tipo gradiente a la resolución del problema discreto relajado

Por simplicidad denotemos

$$h(g) = \ln|\mu^2 I_{N_E^e N_E^e} + (G\hat{H})^t G\hat{H}| + \eta \|g\|_p$$

con $G = \text{diag}(Kg)$ y $g \in B_N \cap (\mathbb{R}_+ \cup \{0\})^{N_E}$.

El gradiente de la función objetivo -obtenido aproximadamente a partir de ésta- en un punto $g_0 \in \text{int}(B_N \cap (\mathbb{R}_+ \cup \{0\})^{N_E})$ está dado por

$$\nabla h(g_0) \approx \left(\frac{h(g_0 + e_1 \Delta g) - h(g_0)}{\Delta g}, \dots, \frac{h(g_0 + e_{N_E} \Delta g) - h(g_0)}{\Delta g} \right)$$

con e_i el i -ésimo vector canónico, $i \in \{1, \dots, N_E\}$ y Δg un paso propio del algoritmo.

Por lo tanto, la aplicación de un método tipo gradiente que no cuente con una expresión explícita de éste requiere, en cada iteración, de un orden de N_E evaluaciones de la función objetivo. En particular ésto implica calcular un orden de N_E productos de la forma $(G\hat{H})^t G\hat{H}$. Las aplicaciones desarrolladas en este trabajo de tesis tienen asociadas un número de variables tan grande que no fue factible aplicar un método de tipo gradiente -que requiriera calcular el gradiente a partir de la función objetivo- a la resolución del problema relajado de red óptima. El tiempo de cómputo en cada iteración del algoritmo resultó ser demasiado grande, quedando como trabajo abierto disminuirlo mediante la obtención de una fórmula explícita para el gradiente de la función objetivo.

Capítulo 4

Resultados

4.1. Configuración general

4.1.1. El modelo meteorológico MM5 y el modelo de dispersión Polyphemus

Polyphemus es un sistema de modelación de la calidad del aire de código abierto desarrollado por ENCP-CEREA (Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique) e INRIA (Institut National de Recherche en Informatique et Automatique). Contiene numerosos modelos de dispersión, para distintos tipos de escalas, para varios tipos de contaminantes, para procesar varios tipos de parámetros de entrada y posee metodologías avanzadas para asimilación de datos, Ensemble Forecasting, acoplamiento de modelos, entre otros. Una descripción más detallada de las etapas de funcionamiento de Polyphemus se puede encontrar en Saide, 2008 [27].

Las simulaciones del modelo meteorológico MM5 forman parte del trabajo de Saide, 2008 [27] y las simulaciones del modelo de dispersión (que tienen como parámetros de entrada los campos meteorológicos MM5), necesarias para el cálculo de la matriz de sensibilidad H , forman parte del trabajo de Melisa Díaz Resquín (UBA).

4.1.2. Dominio del modelo de dispersión

El dominio espacial Ω corresponde la región rectangular ubicada a 25 m de altura, con su extremo suroeste de coordenadas 71.1110°W y 33.7243°S , extendiéndose 54 km en la dirección oeste-este y 44 km en la dirección sur-norte.

El dominio temporal $[0, T]$ corresponde a 10 días contados desde el 15 de Enero del 2002.

La discretización espacial \mathcal{D}_E corresponde a una grilla bidimensional con 28 celdas en la dirección oeste-este y 23 celdas en la dirección sur-norte, equiespaciada cada 2 km y con la celda del extremo suroeste de coordenadas 71.1110°W y 33.7243°S (al igual que Ω).

La discretización temporal \mathcal{D}_T corresponde a la partición horaria del dominio temporal $[0, T]$.

Ahora bien, para obtener mejores resultados las simulaciones del modelo de dispersión se realizaron en un dominio espacial y temporal mayor, que contiene al mencionado anteriormente.

La altura total de este dominio fue determinada de manera que estuviera incluida dentro del modelo meteorológico y que tuviera la altura necesaria para representar las diferencias de altura dadas por la cordillera de los Andes (llegando a altura máxima de 4800 m en esa zona). La división entre niveles fue elegida con una mayor resolución en los primeros niveles para una mejor representación de la capa límite. Así, esta grilla horizontal es de $2 \times 2 \text{ km}^2$ con la celda del extremo suroeste con coordenadas 71.4351°W y 33.9977°S , con 70 celdas en la dirección oeste-este y 63 celdas en la dirección sur-norte. Se ocuparon seis niveles verticales, con el primer nivel a 25 m y el último nivel a 5000 m .

El paso temporal, en concordancia con el paso temporal del modelo meteorológico, se mantuvo de 1 hora. No obstante, estas salidas son promedios de todos los pasos realizados dentro de la hora, ya que la simulación se realizó con un paso de tiempo de 200 segundos, para asegurar la convergencia del modelo. El periodo de simulación se mantuvo en 10 días, partiendo del 15 de Enero del 2002.

4.2. Estructura de las matrices \hat{H} , B y C

4.2.1. Estructura de la matriz de sensibilidad \hat{H}

El conjunto de puntos de emisión \mathcal{E}_E coincide con la discretización espacial \mathcal{D}_E . Temporalmente, las emisiones se han realizado en forma horaria definiendo 15 instantes de emisión (entre las 6:00 y 20:00 horas), de manera tal que una emisión unitaria en la hora $j \in \{1, \dots, 15\}$ se repite a esa misma hora a lo largo de los 10 días de simulación. En estricto rigor y según se ha indicado en la sección 3.3.2, una distribución horaria de las emisiones, entre las 6:00 y 20:00 horas a lo largo de 10 días, implica tener que considerar 15×10 instantes de emisión. Sin embargo, la adaptación aquí expuesta permite reproducir la naturaleza periódica de las emisiones de CO a la vez que reduce considerablemente el número de instantes de emisión y con ello el número de simulaciones del modelo de dispersión.

Dado que, en particular, interesa plantear el problema del diseño óptimo de redes de monitoreo, es necesario contar con la linealización del operador de observación entendido como operador de observación total. Luego, el conjunto de puntos de observación \mathcal{O}_E coincide con la discretización espacial \mathcal{D}_E . Además, el conjunto de instantes de observación \mathcal{O}_T coincide con la discretización temporal \mathcal{D}_T .

Por lo tanto, la matriz \hat{H} tendrá $N_E^o \times N_T^o = 28 \times 23 \times 24 \times 10 = 154560$ filas y $N_E^e \times N_T^e = 28 \times 23 \times 15 = 9660$ columnas, por lo cual es más conveniente utilizar el método directo para el cálculo de \hat{H} , lo cual implica realizar $N_E^e \times N_T^e = 28 \times 23 \times 15 = 9660$ simulaciones del modelo de dispersión.

Posteriormente se realiza un reducción temporal de las columnas de \widehat{H} , pasando de $N_E^e \times N_T^e = 28 \times 23 \times 15 = 9660$ columnas a $N_E^e = 28 \times 23 = 644$ columnas. El tipo de reducción temporal puede ser *promedio* (promedio entre las 6 hrs y las 20 hrs, correspondientes a los instante de emisión 1 y 15), *máximo* (máximo entre las 6 hrs y las 20 hrs, correspondientes a los instante de emisión 1 y 15), *tarde* (15 hrs, correspondiente al instante de emisión 10) o *mañana* (9 hrs, correspondiente al instante de emisión 4).

Luego, si n_{ij} denota el índice de las columnas de \widehat{H} correspondiente al i -ésimo punto espacial de emisión y al j -ésimo punto temporal de emisión, y si $\widehat{H}^r \in \mathcal{M}_{N_E^e N_T^e \times N_E^e}$ denota la reducción temporal de \widehat{H} , se tendrá que $\forall i \in \{1, \dots, N_E^e\}$

1. Si el tipo de reducción es *promedio*: $\widehat{H}_{\bullet i}^r = \sum_{j=1}^{15} \widehat{H}_{\bullet n_{ij}}$
2. Si el tipo de reducción es *máximo*: $\widehat{H}_{\bullet i}^r = \max_{j \in \{1, \dots, 15\}} \widehat{H}_{\bullet n_{ij}}$
3. Si el tipo de reducción es *tarde*: $\widehat{H}_{\bullet i}^r = \widehat{H}_{\bullet n_{i10}}$
4. Si el tipo de reducción es *mañana*: $\widehat{H}_{\bullet i}^r = \widehat{H}_{\bullet n_{i4}}$

La reducción temporal utilizada en este trabajo fue *promedio*. No obstante, algunos resultados obtenidos para la reducción *máximo* indican una alta dependencia de la elección de este parámetro.

4.2.2. Estructura de las matrices de varianza B y C

Todos los criterios de diseño de redes expuestos en este trabajo no dependen del inventario de emisiones y de las observaciones, salvo a través de las matrices de varianza B y C , respectivamente. Por lo tanto, en este caso, el inventario de emisiones y las observaciones son necesarios sólo en la medida en que permiten calcular dichas matrices. Para una exposición detallada de la estructura del inventario de emisiones referirse a Saide, 2008 [27] y para una exposición detallada de la estructura de las observaciones referirse a Saide, 2008 [27] y Osses et al., 2012 [24].

Según Saide, 2008 [27] las matrices B y C se pueden suponer diagonales y con el mismo valor en la diagonal. Para las emisiones, esto significa que los errores cometidos en el cálculo del inventario de emisiones no están correlacionados y que la metodología utilizada en el cálculo del inventario se aplica de manera idéntica en cada punto de éste. Para las observaciones, esto significa que los errores de medición de los instrumentos no están correlacionados y que los instrumentos de medición utilizados en las distintas estaciones de monitoreo son de características similares y que es sólo una la institución responsable de todos ellos. Así, se ha estimado que el error en las emisiones es de un 20% y el error de las observaciones es de un 5%, con lo cual $B = 20I_{N_E^e N_T^e}$ y $C = 5I_{N_E^o N_T^o}$.

Posteriormente, mediante la aplicación de la metodología de la *L-CURVE*, descrita en Saide, 2008 [27], estas cantidades son modificados para obtener un balance óptimo entre el inventario de emisiones y las observaciones, con lo cual se tiene que $B = 16I_{N_E^e N_T^e}$ y $C = 0,09I_{N_E^o N_T^o}$.

4.2.3. Ponderación de las emisiones en base a la densidad poblacional

Posteriormente a la reducción temporal, los puntos de emisión \mathcal{E}_E han sido ponderados por la densidad poblacional. Estos datos han sido obtenidos del Instituto Nacional de Estadísticas (INE) el año 2002 en toda la Región Metropolitana y, en particular, interpolados a la grilla espacial \mathcal{D}_E .

Los resultados para extensión, reducción y optimización de redes que se presentarán en las secciones siguientes se han obtenido utilizando un peso poblacional $\beta = 0.7$, el cual, según se verá más adelante, se ha fijado mediante ensayos previos de extensión de la red MACAM-2009.

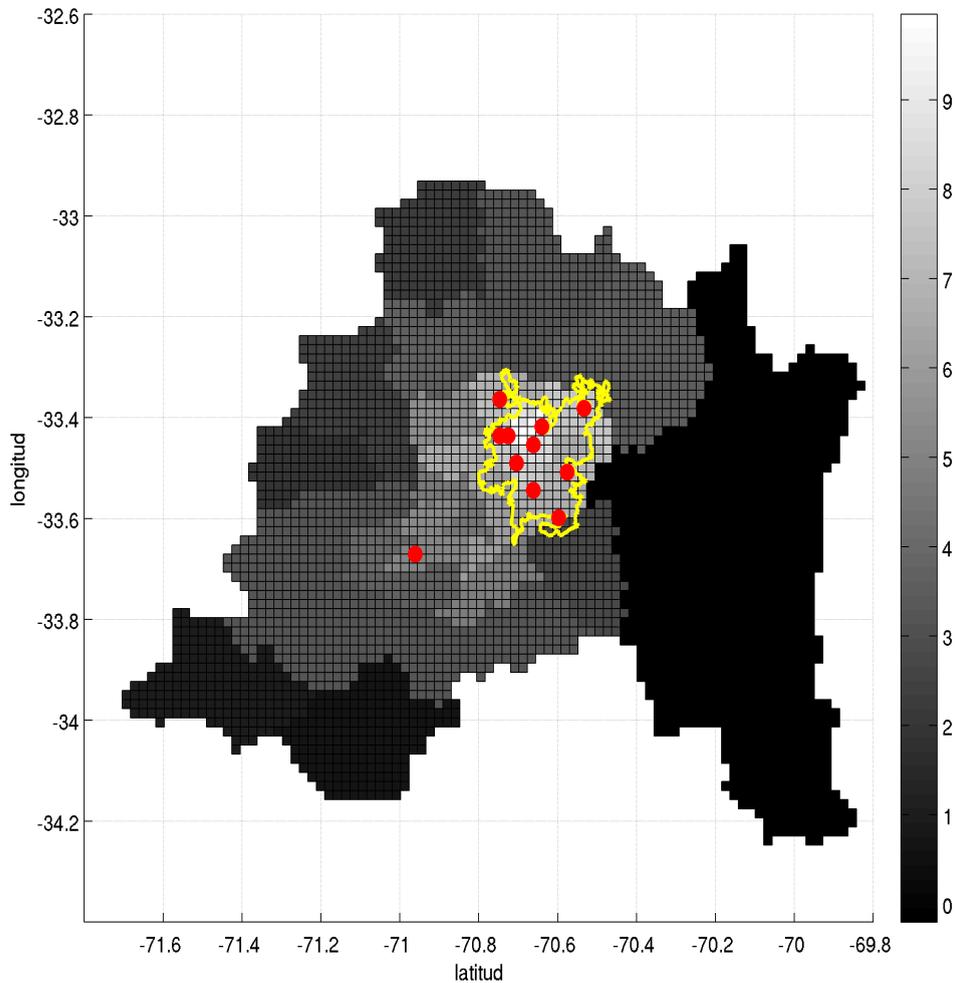


Figura 4.1: Densidad poblacional (INE 2002) para la Región Metropolitana, en $\log(\frac{hab}{km^2})$. La línea amarilla corresponde al límite rural-urbano y los puntos rojos corresponden a la red MACAM-2009.

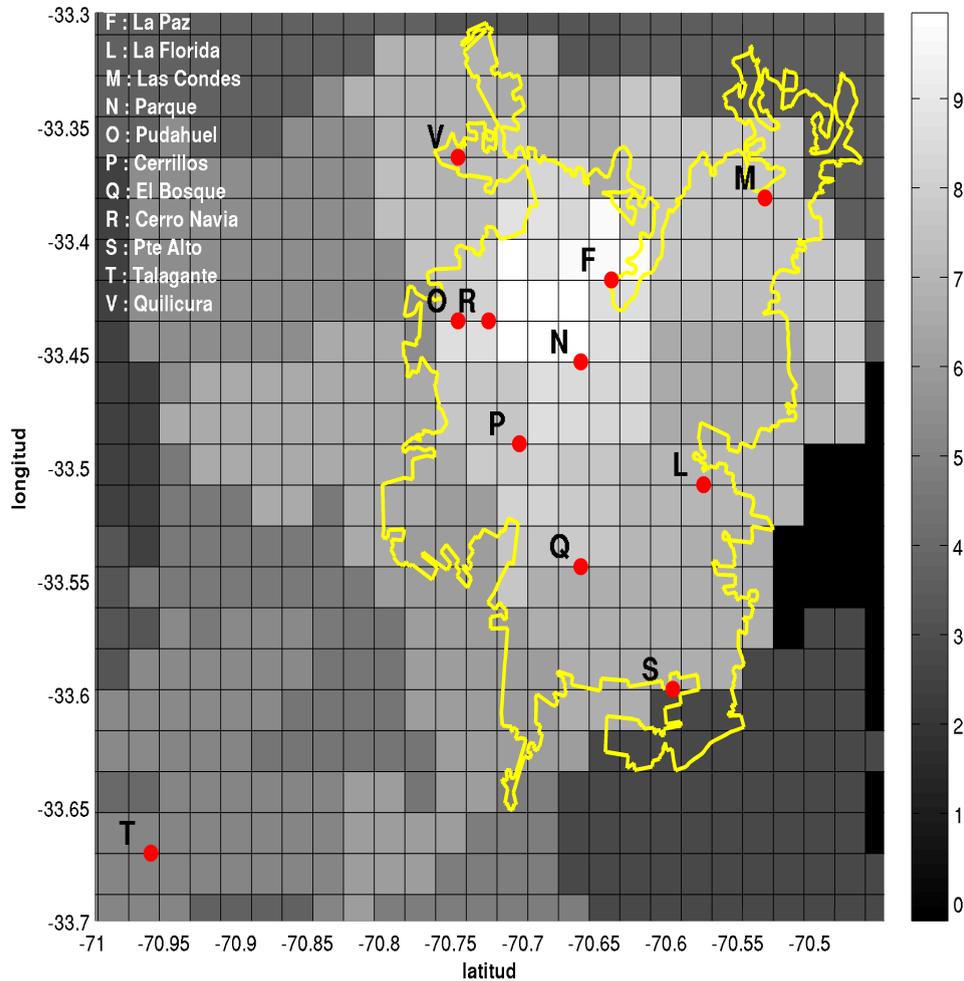


Figura 4.2: Densidad poblacional (INE 2002) para la grilla de emisión, en $\log(\frac{hab}{km^2})$. La línea amarilla corresponde al límite rural-urbano y los puntos rojos corresponden a la red MACAM-2009.

4.2.4. Indicadores de la calidad de una red utilizados

Los indicadores de la calidad de una red de monitoreo utilizados fueron el incremento de la cantidad de información, el rango efectivo y los grados de libertad.

Se decidió utilizar el incremento de la cantidad de información porque, en el sentido de la relación (2.22), parece ser un indicador más completo respecto de la precisión. Además permite comparar los resultados de este trabajo con los obtenidos por Osses et al., 2012 [24], en donde el concepto de cantidad de información se aborda de un punto de vista estadístico.

El rango no resultó ser un buen indicador de la calidad de una red ya que mostró un

valor constante a lo largo de los algoritmos de optimización. Se decidió utilizar el rango efectivo porque corresponde a un indicador estricto de la recuperabilidad, a diferencia del rango combinado que mezcla los conceptos de recuperabilidad y precisión.

Finalmente, se decidió utilizar los grados de libertad porque corresponden a un criterio estudiado por Fisher, 2003 [4] que permite evaluar la calidad del rango efectivo como indicador, y porque, en el sentido de la relación (2.23), parece ser un indicador más completo respecto de la precisión.

Para obtener mejores resultados numéricos los valores de estos indicadores de la calidad se han normalizado por el tamaño de la discretización espacial N_E .

Además, para una red R de tamaño N , el rango efectivo se ha calculado como

$$|\{i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i > \mu\}| \quad \text{en vez de} \quad |\{i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i \gg \mu\}|$$

constituyendo una sobreestimación de la definición original. Esta modificación se justifica en el hecho de que una expresión estrictamente matemática para la afirmación $\lambda_i \gg \mu$ dependerá, en última instancia, de la relación entre los valores singulares de $\widehat{H}_{0\beta}$ y μ ; y no es recomendable tal dependencia al definir un indicador de la calidad de una red.

4.3. Resultados de la extensión y reducción de la red MACAM-2009

4.3.1. Extensión

Dado un indicador de la calidad y un peso poblacional fijos, el mapa de aumento de la calidad asociado ha sido normalizado linealmente entre 0 y 100.

Es decir, para $i \in \{1, 2\}$ sea φ_i la función de aumento de la calidad para un indicador de la calidad f_i y un peso poblacional β_i . Los valores de φ_i han sido normalizados linealmente tomando como referencia los puntos $(\min \varphi_i, \max \varphi_i)$ y $(0, 100)$. Por lo tanto, el conjunto de valores normalizados de φ_1 y φ_2 no son comparables entre sí, aunque cada uno por sí solo permite construir los mapas de aumento de la calidad asociados a esta la red.

Extensión de la red para el incremento de la cantidad de información

En la figura 4.3 (a), el mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el incremento de la cantidad de información y peso poblacional $\beta = 0.3$ muestra aumentos de la calidad mayores a 70 en la región rural no cubierta por estaciones de monitoreo, incluyendo porciones de la banda latitudinal ubicada al oeste de la estación de Talagante. Sin embargo, los aumentos de la calidad mayores a 80 se concentran en la región rural ubicada entre la estación de Talagante y la zona urbana de Santiago. La zona urbana de Santiago no presenta valores significativos de aumento de la calidad, aunque se observa un máximo relativo en la región desprovista de estaciones de monitoreo al oeste de la

estación de Las Condes.

En la figura 4.3 (b), vemos que al incrementar el peso poblacional a $\beta=0.5$ los aumentos de la calidad de la red mayores a 70 se desplazan hacia la región ubicada entre la estación de Talagante y la zona urbana de Santiago, restándole importancia a todo punto al oeste de la estación de Talagante. Esta región rural continúa teniendo aumentos de la calidad mayores a 80 e incluso a 90, con máximos relativos mucho más definidos. La zona urbana de Santiago presenta aumentos de la calidad mayores a 80, pero menores a 90, en la región desprovista de estaciones de monitoreo al oeste de la estación de Las Condes, cobrando una importancia comparable a la región rural antes mencionada.

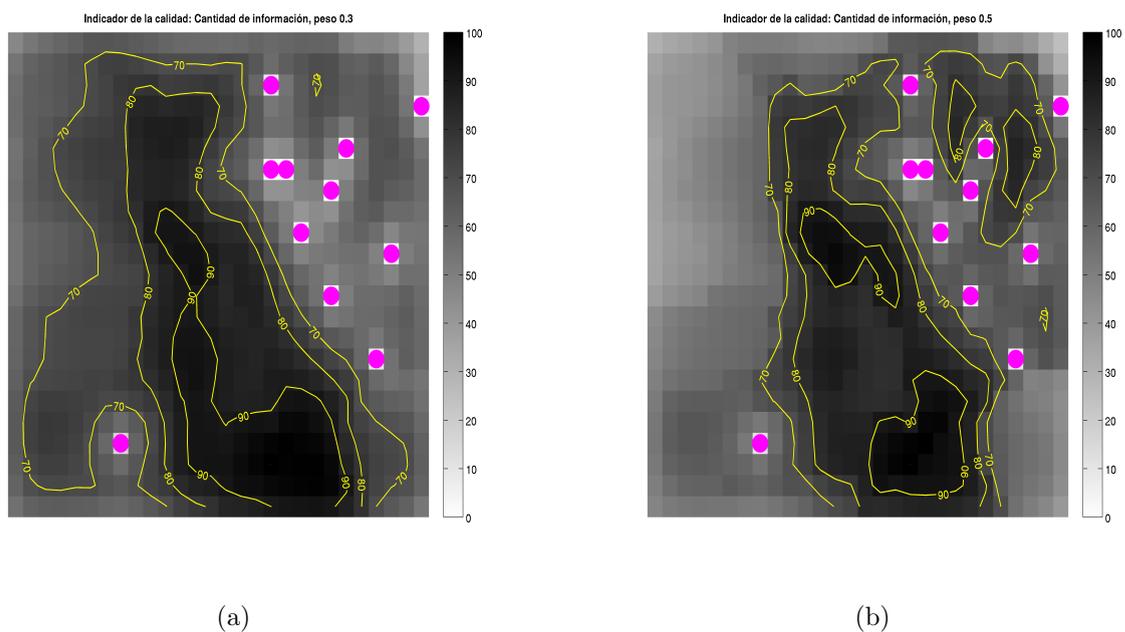


Figura 4.3: Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el incremento de la cantidad de información con peso poblacional 0.3 y 0.5. Los puntos magenta indican la posición, en la grilla de observación, de los puntos de la red MACAM-2009 y las líneas amarillas corresponden a las curvas de nivel 70, 80 y 90 para el aumento de la calidad.

Finalmente la figura 4.4, muestra que al incrementar el peso poblacional a $\beta=0.7$ los aumentos de la calidad mayores a 90 se ubican en la región urbana no cubierta por estaciones, dejando en segunda instancia, con valores mayores a 80 pero menores a 90, a la región rural ya descrita.

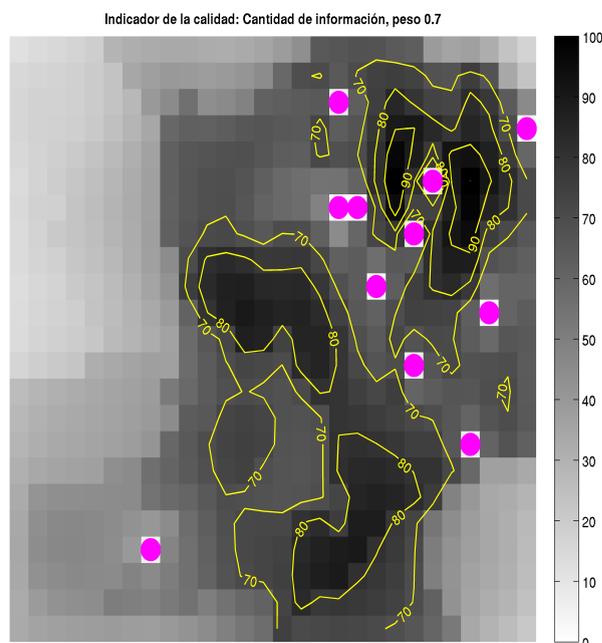


Figura 4.4: Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el incremento de la cantidad de información con peso poblacional 0.7. Los puntos magenta indican la posición, en la grilla de observación, de los puntos de la red MACAM-2009 y las líneas amarillas corresponden a las curvas de nivel 70, 80 y 90 para el aumento de la calidad.

Extensión de la red para los grados de libertad

El mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para los grados de libertad y peso poblacional $\beta = 0.3$ también muestra aumentos de la calidad mayores a 70 en la región rural no cubierta por estaciones de monitoreo, incluyendo porciones de la banda latitudinal ubicada al oeste de la estación de Talagante y con una mayor cobertura espacial en comparación al mapa de incremento de la calidad de información. Nuevamente, los aumentos de la calidad mayores a 80 se concentran en la región rural ubicada entre la estación de Talagante y la zona urbana de Santiago. La zona urbana de Santiago no presenta valores significativos de aumento de la calidad, aunque se observa un pequeño máximo relativo, con aumento de la calidad mayor a 70 pero menor a 80, en la región desprovista de estaciones de monitoreo al oeste de la estación de Las Condes.

Al aumentar el peso poblacional a $\beta = 0.5$ los resultados son similares en comparación al mapa de incremento de la calidad de información, pero manteniendo una mayor cobertura espacial de las regiones con aumentos de la calidad mayores a 70.

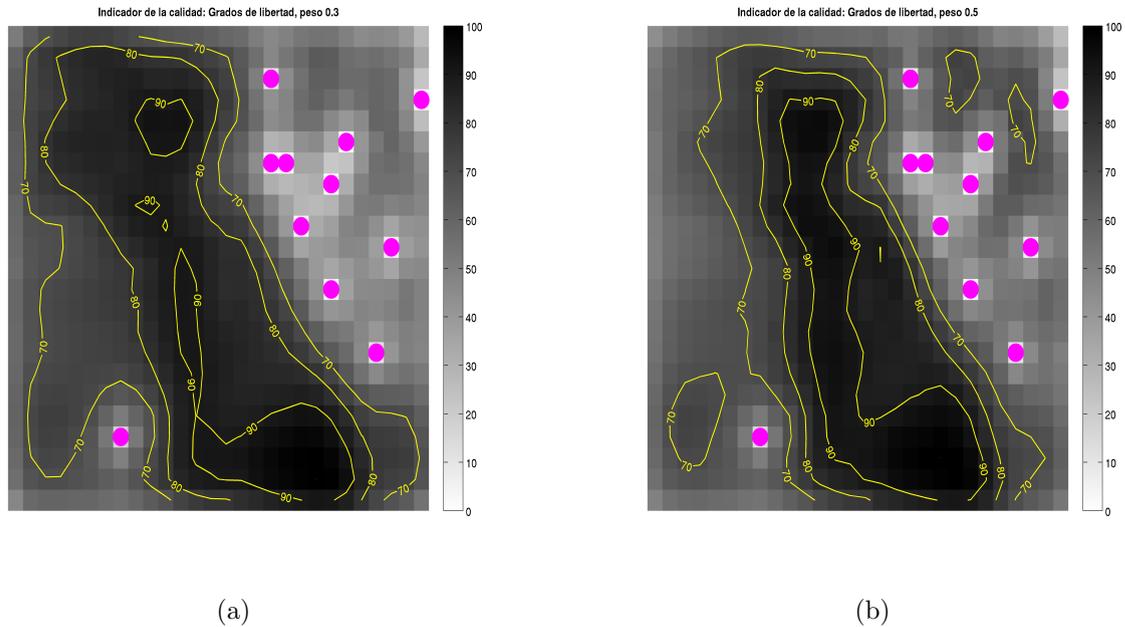


Figura 4.5: Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para los grados de libertad con peso poblacional 0.3 y 0.5. Los puntos magenta indican la posición, en la grilla de observación, de los puntos de la red MACAM-2009 y las líneas amarillas corresponden a las curvas de nivel 70, 80 y 90 para el aumento de la calidad.

Finalmente, al aumentar el peso poblacional a $\beta=0.7$ los aumentos de la red mayores a 90 se ubican en la región rural entre la estación de Talagante y al zona urbana de Santiago, dejando en segunda instancia, con valores mayores a 80 pero menores a 90, a la región urbana no cubierta por la estaciones.

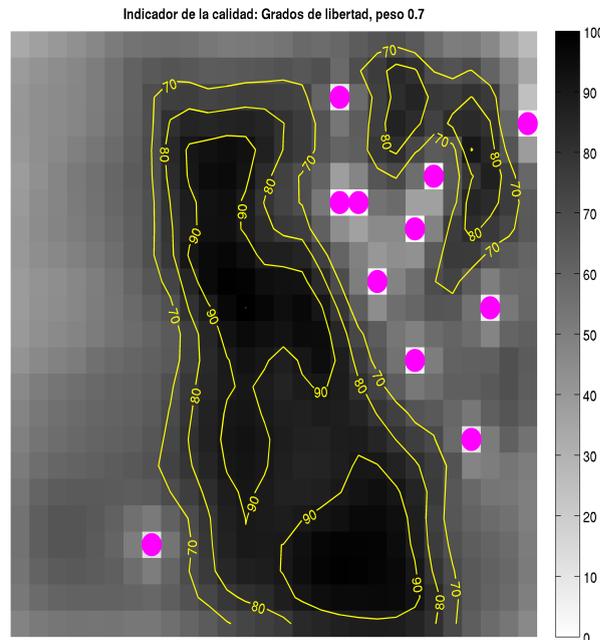


Figura 4.6: Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para los grados de libertad con peso poblacional 0.7. Los puntos magenta indican la posición, en la grilla de observación, de los puntos de la red MACAM-2009 y las líneas amarillas corresponden a las curvas de nivel 70, 80 y 90 para el aumento de la calidad.

Por lo tanto, para un peso poblacional 0.7, no obstante de presentar mapas de aumento de la calidad similares, los grados de libertad tienden a concentrar el mayor aumento de la calidad en regiones rurales poco monitoreadas y el incremento de la cantidad de información tiende a concentrar el mayor aumento de la calidad en regiones urbanas poco monitoreadas.

Extensión de la red para el rango efectivo

Los mapas de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el rango efectivo presentan diferencias con los mapas anteriores. Para todos los pesos poblacionales, 0.3, 0.5 y 0.7, el mapa de aumento de la calidad para el rango efectivo presenta amplias regiones con valores constantes para el aumento de la calidad, con fuertes gradientes entre ellas, lo cual se traduce en una alta insensibilidad espacial. Esto se debe posiblemente a la definición de rango efectivo, $|\{i \in \{1, \dots, r\} : \lambda_i > \mu\}|$, según la cual un incremento de éste depende de si la magnitud de los valores singulares de la matriz de sensibilidad superan o no un valor umbral μ , y no de su magnitud en sí.

Sin embargo, los mapas de aumento de la calidad para el rango efectivo presentan los mismos rasgos principales que los mapas de aumento de la calidad para los de grados de libertad, siendo estos primeros mucho más claros en indicar las regiones de mayor aumento de la calidad, según puede apreciarse especialmente en el caso con peso poblacional $\beta = 0.7$.

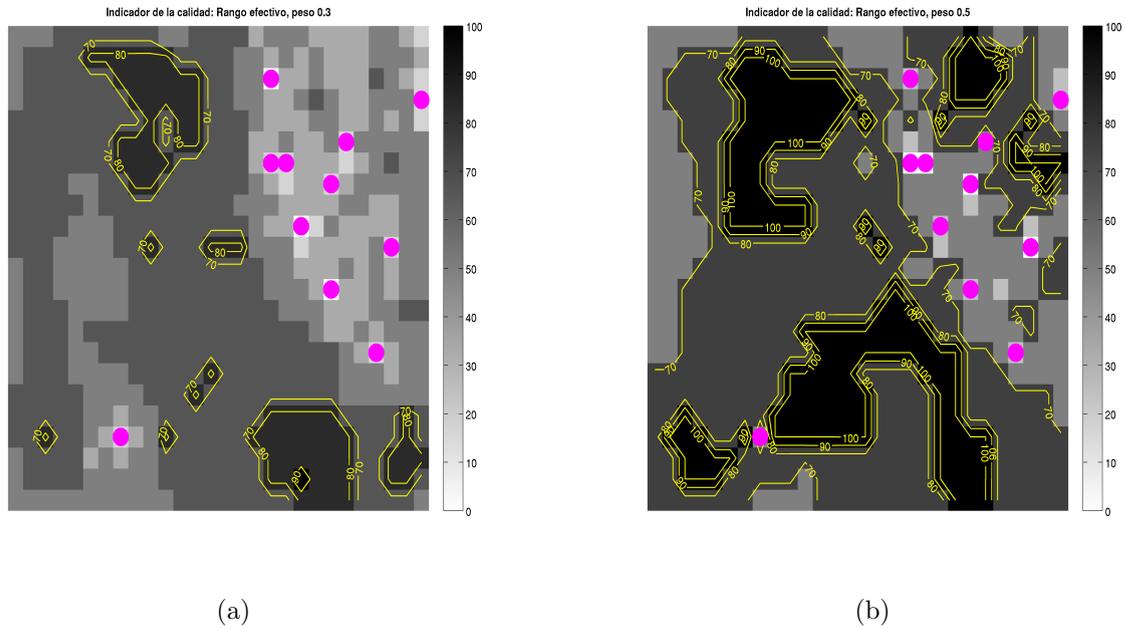


Figura 4.7: Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el rango efectivo con peso poblacional 0.3 y 0.5. Los puntos magenta indican la posición, en la grilla de observación, de los puntos de la red MACAM-2009 y las líneas amarillas corresponden a las curvas de nivel 70, 80 y 90 para el aumento de la calidad.

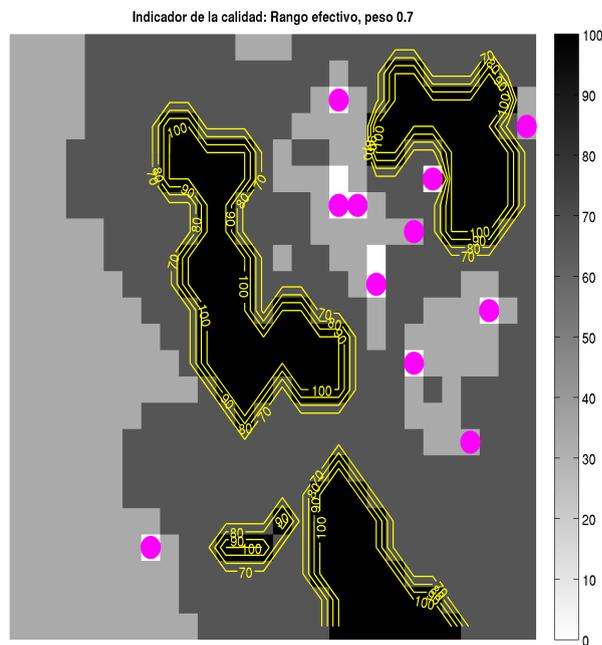


Figura 4.8: Mapa de aumento de la calidad de la red MACAM-2009 para el rango efectivo con peso poblacional 0.7. Los puntos magenta indican la posición, en la grilla de observación, de los puntos de la red MACAM-2009 y las líneas amarillas corresponde a las curvas

de nivel 70, 80 y 90 para el aumento de la calidad.

Para todos estos indicadores de la calidad de una red (incremento de la calidad de información, rango efectivo y grados de libertad) el peso poblacional $\beta = 0.7$ es tal que hace comparables los aumentos de la calidad asociados a la región rural entre la estación de Talagante y la zona urbana de Santiago, y la zona urbana de Santiago al oeste de la estación de Las Condes. Este hecho se utilizó para fijar, en lo que sigue de este trabajo, el peso poblacional en $\beta = 0.7$.

4.3.2. Reducción

Dado un indicador de la calidad y un peso de la población, los valores de la función de disminución de la calidad han sido normalizados linealmente entre 0 y 100.

Es decir, para $i \in \{1, 2\}$ sea φ_i la función de disminución de la calidad para un indicador de la calidad f_i y un peso poblacional β_i . Los valores de φ_i han sido normalizados linealmente tomando como referencia los puntos $(\min \varphi_i, \max \varphi_i)$ y $(0, 100)$. Por lo tanto, el conjunto de valores normalizados de φ_1 y φ_2 no son comparables entre sí, aunque cada uno por sí solo permite ordenar las estaciones de la red de monitoreo en función de la disminución de la calidad que cada una de éstas tiene asociada.

Luego, las estaciones con mayores valores de disminución de la calidad son las menos indicadas para ser eliminadas y las estaciones con menores valores de disminución de la calidad son las más indicadas para ser eliminadas.

Los resultados que se exponen a continuación han sido obtenidos para peso poblacional 0 y 0.7.

Reducción de la red para el incremento de la cantidad de información

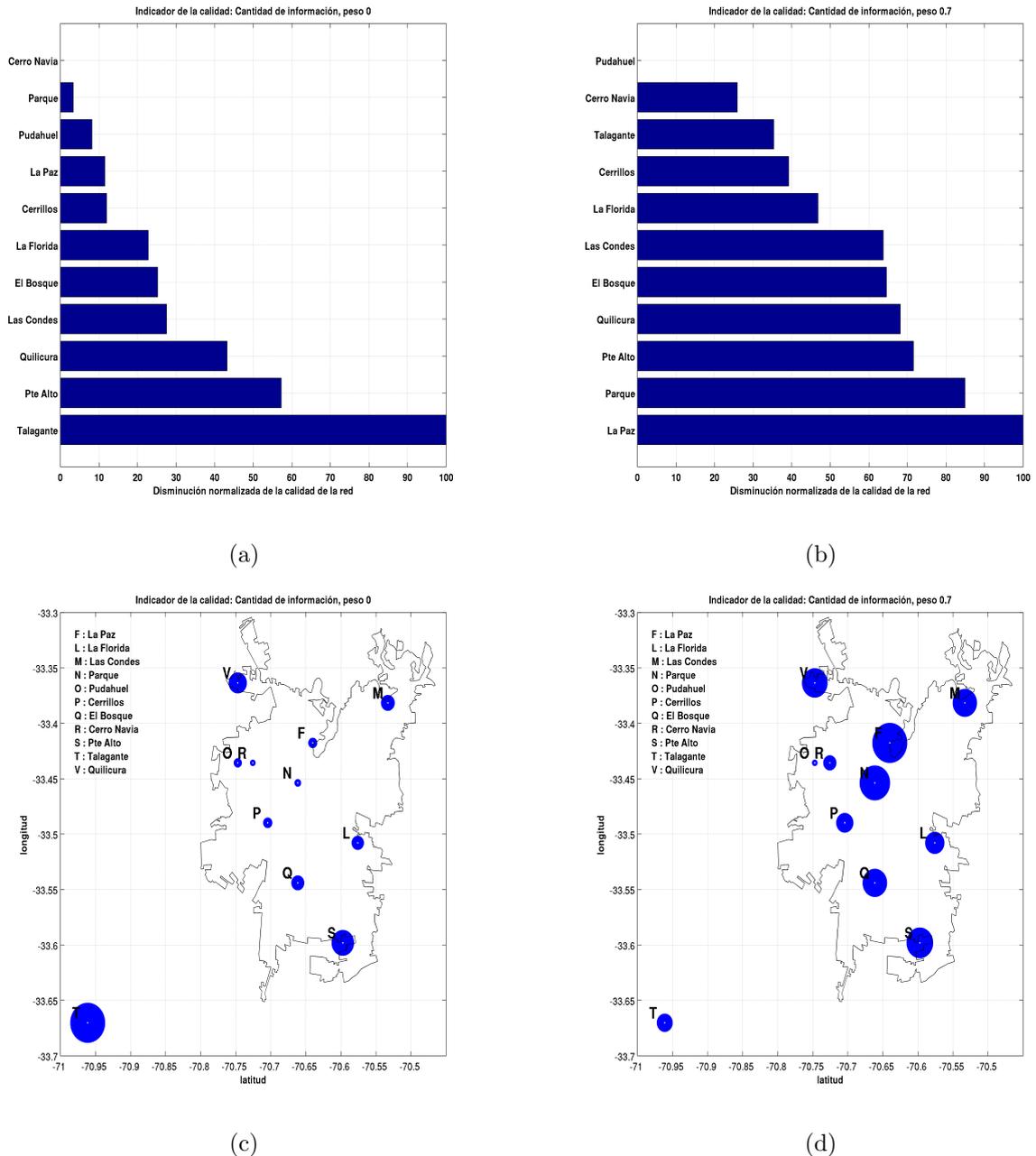


Figura 4.9: Reducción de la red MACAM-2009 para el incremento de la cantidad de información con peso poblacional 0 y 0.7. (a) y (b) corresponden a la disminución de la calidad para el incremento de la cantidad de información con peso poblacional 0 y 0.7, respectivamente. (c) y (d) corresponden a los mapas de disminución de la calidad para el incremento de la cantidad de información con peso poblacional 0 y 0.7, respectivamente. Los radios de los círculos son lineales afines a la disminución de la calidad de cada estación.

Nota: Desde el punto de vista de la reducción de una red de monitoreo, la relevancia de las estaciones que la conforman viene dada por su distribución geográfica en relación al patrón característico de dispersión. Así, el hecho de que la eliminación de una estación

periférica tenga asociada una pérdida significativa de la calidad de la red, puede deberse a que no exista otra estación viento abajo de las emisiones y/o geográficamente cercana que en algún grado la sustituya.

En el gráfico de barras de la figura 4.9 (a), para el caso $\beta = 0$, los mayores valores para la disminución de la calidad están asociados a las estaciones de Las Condes (M), Quilicura (V), Puente Alto (S) y Talagante (T), mientras que los menores valores para la disminución de la calidad están asociados a las estaciones de Cerro Navia (R), Parque (N) y Pudahuel (O).

Notemos que las estaciones de Las Condes (M), Quilicura (V) y Puente Alto (S) se ubican en la periferia de la zona urbana de Santiago y la estación de Puente Alto (T) se ubica en el extremo suroeste del dominio, correspondiendo a la más periférica de la red. El hecho de que la estación de Talagante (T) tenga asociada la mayor disminución de la calidad es concordante con lo descrito en la Nota anterior; así como el caso de Las Condes (M) que a pesar de ser periférica a la zona urbana tiene una menor disminución de la calidad al encontrarse viento abajo del centro de la ciudad, el cual concentra la mayor parte de las emisiones y de las estaciones de monitoreo.

Por otro lado, la estación de Parque (N) se encuentra en el centro de la ciudad y su bajo valor de disminución de la calidad es concordante con los resultados de Osses et al., 2012 [24] en donde es descrita como una estación representativa de la cuenca de Santiago. El caso de las estaciones de Cerro Navia (R) y Pudahuel (O) es más complejo, pues al parecer su extrema cercanía hace que la remoción de una sea inmediatamente compensada por la otra.

En el gráfico de barras de la figura 4.9 (b), para el caso $\beta = 0.7$, los mayores valores para la disminución de la calidad están asociados a las estaciones de Parque (N) y La Paz (F), mientras que los menores valores para la disminución de la calidad están asociados a las estaciones de Pudahuel (O), Cerro Navia (R) y Talagante (T).

Al considerar este peso poblacional, los mayores valores para la disminución de la calidad se concentran en el centro de la ciudad, donde la población es mayor. Del mismo modo, el bajo valor de población en la región asociada a la estación de Talagante (T) hace que ésta presente una baja disminución en la calidad. Finalmente, a pesar del peso poblacional, se continua observando el acople antes descrito entre las estaciones de Cerro Navia (R) y Pudahuel (O).

Reducción de la red para los grados de libertad

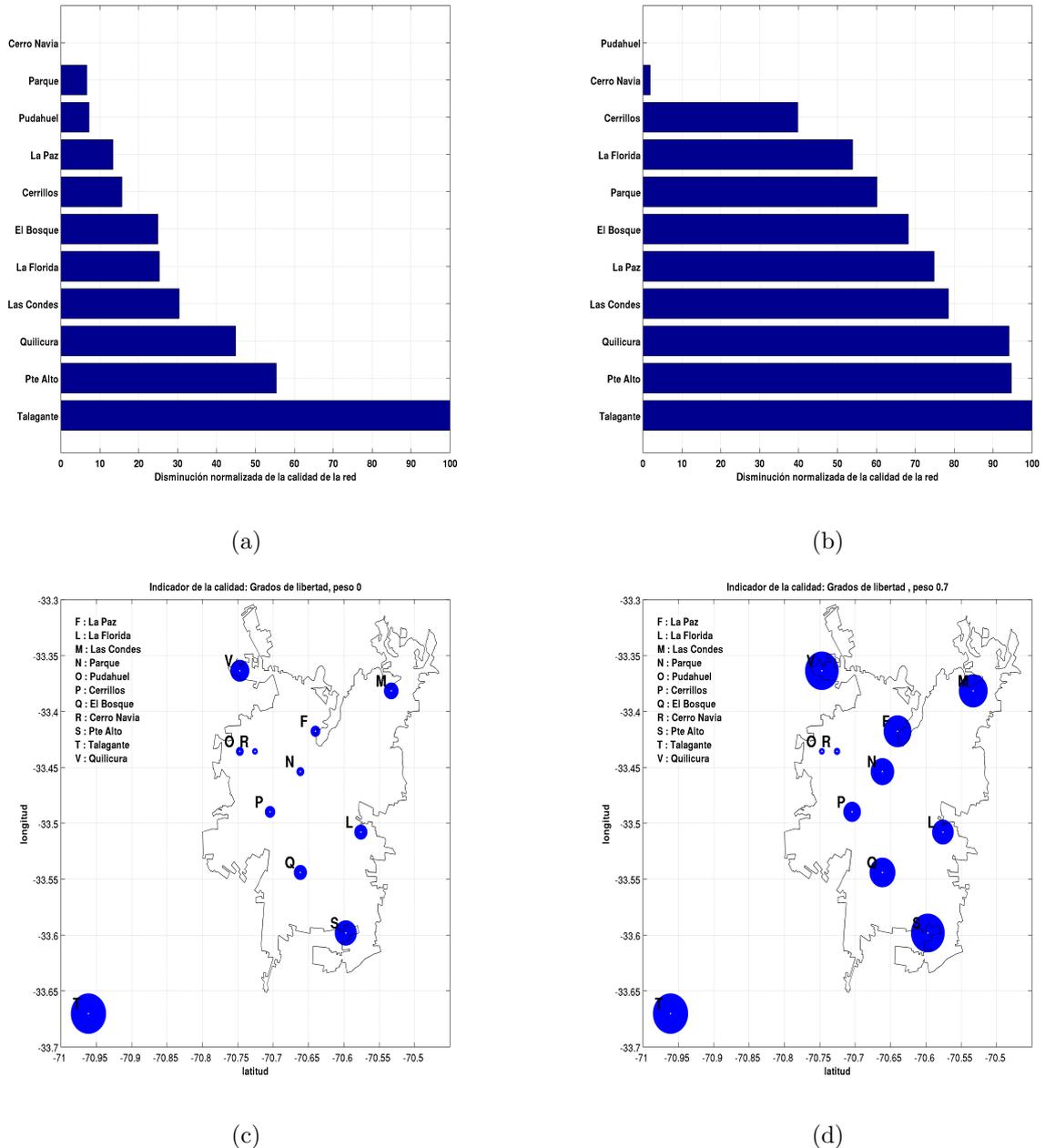


Figura 4.10: Reducción de la red MACAM-2009 para los grados de libertad con peso poblacional 0 y 0.7. (a) y (b) corresponden a la disminución de la calidad para los grados de libertad con peso poblacional 0 y 0.7, respectivamente. (c) y (d) corresponden a los mapas de disminución de la calidad para los grados de libertad con peso poblacional 0 y 0.7, respectivamente. Los radios de los círculos son lineales afines a la disminución de la calidad de cada estación.

En el gráfico de barras en la figura 4.10 (a) y en el mapa de disminución de la calidad en la figura 4.10 (c), para el caso $\beta = 0$, se ve que la disminución de la calidad para los grados de libertad sigue el mismo patrón que el caso anterior, en donde el indicador de la

calidad es el incremento de la cantidad de información.

Ahora bien, en el gráfico de barras en la figura 4.10 (b) y en el mapa de disminución de la calidad en la figura 4.10 (d), al aumentar el peso de la población a $\beta = 0.7$, se ve que los mayores valores para la disminución de la calidad *siguen siendo* los asociados a las estaciones periféricas de Quilicura (V), Puente Alto (S) y Talagante (T). Es decir, para los grados de libertad, el peso de la población tiene un efecto menor sobre las estaciones periféricas en comparación al efecto que tiene el incremento de la cantidad de información. Finalmente, a pesar del peso poblacional, las estaciones de Cerro Navia (R) y Pudahuel (O) nuevamente tienen los menores valores de disminución de la calidad.

Cluster de la red en base a su sensibilidad y una primera aproximación al problema de comparar redes de distinto tamaño

En las reducciones de la red MACAM-2009 estudiadas en la sección anterior se observa que, independiente del peso poblacional, los menores valores para la disminución de la calidad están asociados a las estaciones de Pudahuel (O) y Cerro Navia (R). Posiblemente esto se debe a la extrema cercanía entre estas estaciones, encontrándose, de hecho, en puntos adyacentes de la grilla de observación, de manera tal que la remoción de una de ellas es inmediatamente compensada por la otra.

De hecho, si los patrones de dispersión son apropiados, este mismo fenómeno de acoplamiento podría darse en un conjunto de estaciones no necesariamente adyacentes, pero sí lo suficientemente cercanas entre sí.

Una manera de cuantificar esta noción de cercanía entre estaciones es mediante un análisis de cluster en base a la matriz de sensibilidad asociada a la red. Para ésto trabajaremos con la matriz \widehat{H} y no con su versión de emisiones ponderadas y reducidas temporalmente $\widehat{H}_{0\beta}^r$, ya que el considerar peso poblacional nulo permite agrupar las estaciones sólo en base al patrón de dispersión y el no considerar una reducción temporal de las emisiones permite contar con más información para realizar la agrupación.

Fijemos una red R de tamaño N con matriz de sensibilidad H_R . Dado que interesa agrupar N estaciones de monitoreo, consideraremos una reducción temporal *promedio* de las observaciones, similar a la expuesta en la Sección 4.2.1.

Más precisamente, sea m_{kl} el índice de las filas de H_R correspondiente al k -ésimo punto de observación y al l -ésimo instante de observación. Sea $X \in \mathcal{M}_{N \times N_E^e N_T^o}$ la matriz de cluster definida por

$$X_{k\bullet} = \frac{1}{N_T^o} \sum_{l=1}^{N_T^o} (H_R)_{m_{kl}\bullet}$$

Las figuras 4.11 (a) y (c) muestran los dendrogramas obtenidos a partir de X para una jerarquización con método/distancia *average/cosine* y *ward/cor*, respectivamente (ver Matlab Documentation en www.mathworks.com). Podemos ver que en ambos casos las estaciones de Pudahuel (O) y Cerro Navia (R) se encuentran significativamente más cerca entre sí, respecto del resto de las estaciones.

Las figuras 4.11 (b) y (d) muestran gráficamente la jerarquización de algunas ramas de los dendrogramas (a) y (c), respectivamente. Podemos ver que en algunos casos la jerarquización se desarrolla según la distancia geográfica y la dirección media del viento (del suroeste). Sin embargo, éstas y otras jerarquizaciones realizadas para distintas versiones de los parámetros método/distancia (no mostradas en este trabajo), indican que no hay un patrón general de agrupamiento más allá del sistemáticamente mostrado por las estaciones de Pudahuel (O) y Cerro Navia (R).

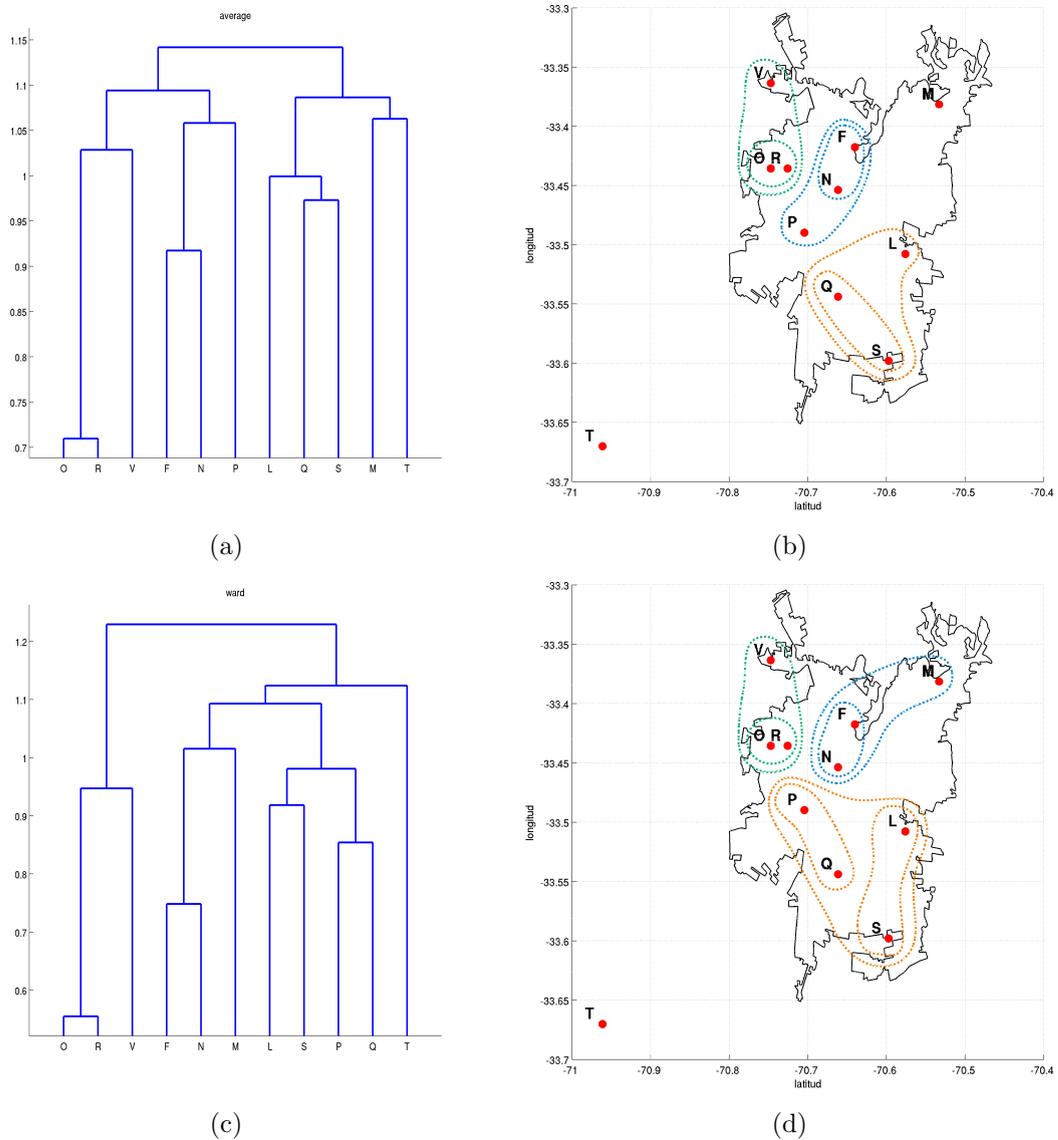


Figura 4.11: Dendrogramas para las métricas *average/cosine* y *ward/cor* en base a la sensibilidad de la red MACAM-2009. En (a) y (c) dendrogramas para método/distancia *average/cosine* y *ward/cor* en base a la sensibilidad de la red MACAM-2009. En (b) y (d) jerarquización de algunas ramas de los dendrogramas (a) y (c), respectivamente.

Tomando en cuenta la información entregada por el análisis de cluster, es posible replantear el problema de reducción de la red MACAM-2009 considerando conjuntamente las estaciones (O) y (R). Se proponen dos maneras de realizar esto:

1. Eliminando ambas estaciones, (O) y (R), a la vez

Notemos que al eliminar cualquiera de las estaciones (V), (M), (L), (S), (Q), (T), (P), (N) o (F), el indicador de la calidad se calcula considerando 10 estaciones. Sin embargo, al eliminar ambas estaciones (O) y (R) a la vez, el indicador de la calidad se calcula considerando 9 estaciones.

Ahora bien, todos los indicadores de la calidad expuestos en este trabajo dependen fuertemente del tamaño de la red. Ésto nos conduce a discutir la validez de la

comparación entre indicadores de la calidad obtenidos para redes de distinto tamaño. En este sentido, discutamos primeramente la validez del cómo se han planteado hasta ahora los problemas de extensión y reducción. Para esto, sea f un indicador de la calidad de una red de monitoreo R de tamaño N .

Para f , R y N fijos, recordemos que la función

$$\begin{aligned} \varphi : \mathcal{D}_E \setminus R &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (x, y) &\longmapsto \varphi(x, y) = f(H_{R \cup \{(x,y)\}}) - f(H_R) \end{aligned}$$

permite estudiar el aumento de la calidad de la red cuando se incorpora un nuevo punto de observación.

Los términos $f(H_{R \cup \{(x,y)\}})$ y $f(H_R)$ no son comparables entre sí, pues se calculan considerando $N + 1$ y N estaciones, respectivamente. Sin embargo, al ser $f(H_R)$ constante, los valores de φ dependen, en última instancia, del término $f(H_{R \cup \{(x,y)\}})$, el cual siempre considera $N + 1$ estaciones.

Análogamente, recordemos que la función utilizada en esta sección

$$\begin{aligned} \varphi : R &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (x, y) &\longmapsto \varphi(x, y) = f(H_R) - f(H_{R \setminus \{(x,y)\}}) \end{aligned}$$

permite estudiar la disminución de la calidad de la red cuando se elimina alguno de sus puntos de observación.

Nuevamente, los términos $f(H_R)$ y $f(H_{R \setminus \{(x,y)\}})$ no son comparables entre sí, pues se calculan considerando N y $N - 1$ estaciones, respectivamente. Sin embargo, al ser $f(H_R)$ constante, los valores de φ dependen, en última instancia, del término $f(H_{R \setminus \{(x,y)\}})$, el cual siempre considera $N - 1$ estaciones.

Por lo tanto, la situación ya descrita, en la cual se eliminan ambas estaciones (O) y (R), a la vez, es el único caso real de comparación entre redes de distinto tamaño.

Para el incremento de la cantidad de información y los grados de libertad, una manera de abordar este problema de comparación es realizando la siguiente modificación en sus definiciones:

Recordemos que si $\forall i \in \{1, \dots, \text{rg}(H_R)\} : \lambda_i < \mu$, entonces el incremento de la cantidad de información y los grados de libertad se aproximan al primer orden por la precisión, es decir

$$\begin{aligned} \ln \left| I_{N_E^e N_T^e} + \frac{H_R^t H_R}{\mu^2} \right| &\approx \text{Tr} \left(\frac{H_R^t H_R}{\mu^2} \right) = \sum_{i=1}^{\text{rg}(H_R)} \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \\ \text{gl}(H_R) &\approx \text{Tr} \left(\frac{H_R^t H_R}{\mu^2} \right) = \sum_{i=1}^{\text{rg}(H_R)} \frac{\lambda_i^2}{\mu^2} \end{aligned}$$

Si definimos la precisión *por estación* como $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\text{rg}(H_R)} \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}$, entonces las aproximaciones anteriores motivan definir las siguientes modificaciones al incremento de la cantidad de información y a los grados de libertad

$$\ln \left| I_{N_E^e N_T^e} + \frac{H_R^t H_R}{N \mu^2} \right| \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\text{rg}(H_R)} \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}$$

$$\text{gl} \left(\frac{H_R}{\sqrt{N}} \right) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\text{rg}(H_R)} \frac{\lambda_i^2}{\mu^2}$$

En este trabajo no se aplicarán ni se continuará discutiendo la validéz de estas modificaciones a los indicadores de la calidad. Sin embargo, para cerrar esta discusión, en la figura 4.12 se muestra la evolución del incremento de la calidad de información, en su definición original y por estación, para la red MACAM entre los años 1988 y 2009

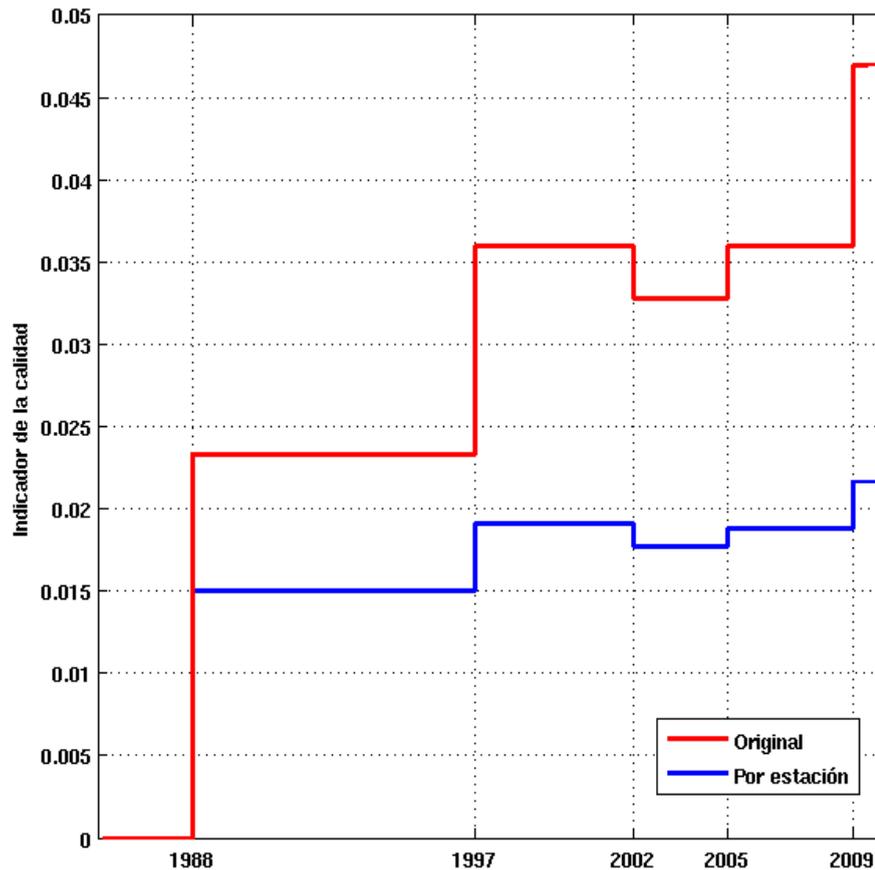


Figura 4.12: Evolución histórica de la modificación al incremento de la cantidad de información para la red MACAM.

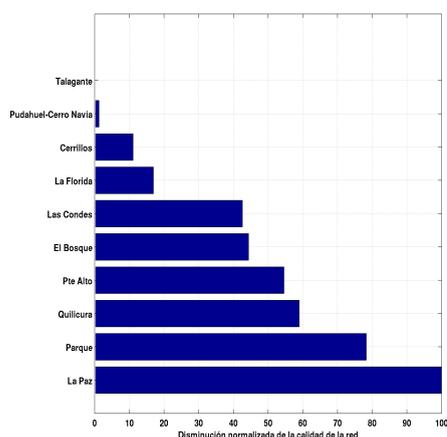
2. Reduciendo ambas estaciones, (O) y (R), a una nueva estación (O-R) y eliminándola

Para evitar comparaciones entre indicadores de calidad obtenidos para redes de distinto tamaño, es posible reducir las estaciones (O) y (R) a una nueva estación (O-R). No obstante, es importante señalar que la factibilidad de este método se debe a que, en este caso, las estaciones tienen gran cercanía geográfica.

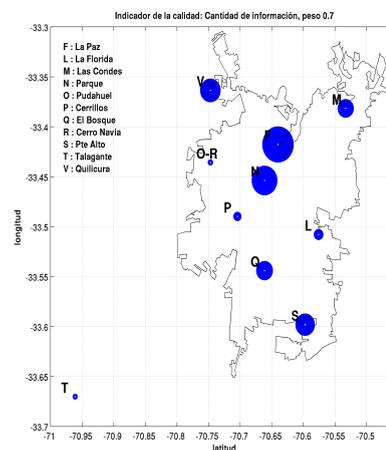
Sea H la matriz de sensibilidad asociada a la red MACAM-2009. Sean k_O y k_R los índices de las filas de H asociados a las estaciones (O) y (R), respectivamente. Apartir de H definamos una nueva matriz de sensibilidad \tilde{H} , idéntica a H salvo el hecho de que los bloques fila correspondientes a k_O y k_R han sido reemplazados por el bloque fila obtenido a partir del promedio entre éstos dos.

Es decir, la sensibilidad de la nueva estación (O-R) corresponde al promedio de las sensibilidades de las estaciones (O) y (R). Del mismo modo, se define la ubicación geográfica de la estación (O-R) como el promedio de las ubicaciones geográficas de las estaciones (O) y (R).

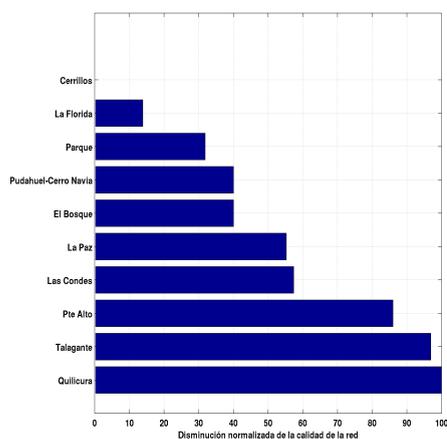
En la figura 4.13 se ve esta modificación del método de reducción para la red MACAM-2009, con peso poblacional $\beta = 0.7$. Para el caso de los grados de libertad y el rango efectivo, los menores valores de disminución de la calidad no están asociados a la estación (O-R), lo cual sugiere que esta modificación ha logrado representar bien el fenómeno de acople entre las estaciones (O) y (R). Sin embargo, para el caso del incremento de la calidad de información la estación (O-R) tiene el segundo menor valor para la disminución de la calidad.



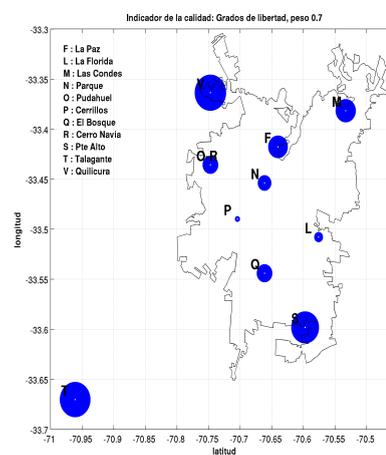
(a)



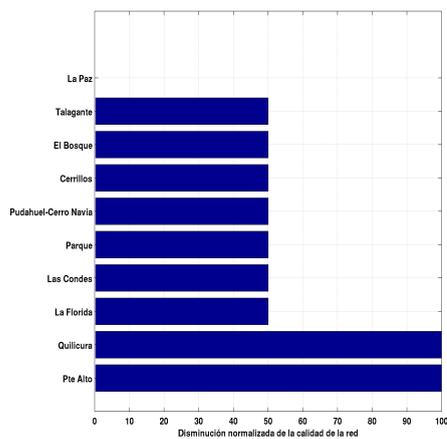
(b)



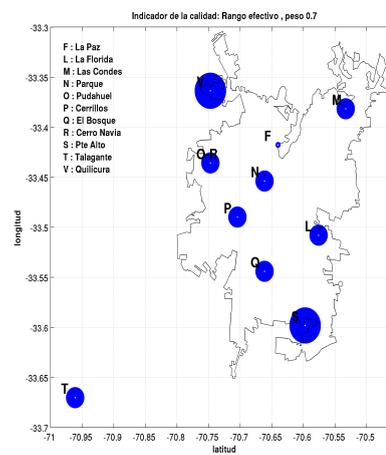
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 4.13: Reducción de la red MACAM-2009 con peso poblacional 0 y 0.7, considerando conjuntamente las estaciones O y R. En (a) y (b) el caso del incremento de la cantidad de información, en (c) y (d) el caso de los grados de libertad, en (e) y (f) el caso del rango efectivo.

4.4. Resultados del diseño óptimo de una red

Se han abordado los siguientes problemas de diseño óptimo:

1. Obtención de la red óptima MAX-MIN a partir de la red inicial MACAM-2009
2. Obtención de la red óptima con respecto a los indicadores de calidad:
 - a) Incremento de la cantidad de información
 - b) Grados de libertad
 - c) Rango efectivo

a partir de las redes iniciales:

- a) MACAM-2009
- b) MAX-MIN
- c) RANDOM

en donde la red RANDOM se refiere a una red aleatoria fija.

De acuerdo a la relación (C.1) del Apéndice C, el número máximo de evaluaciones del indicador de calidad para un proceso de optimización de N_{iter} iteraciones está dado por

$$K(1) \left(\frac{\rho^{N_{iter}} - 1}{\rho - 1} \right)$$

en donde $K(1)$ y ρ son parámetros internos del algoritmo Recocido Simulado. Por otro lado, el número de evaluaciones del indicador de calidad para la resolución *a fuerza bruta* del problema de optimización es del orden de

$$\binom{N_E}{N}$$

en donde N_E es el tamaño de la discretización espacial de la grilla de trabajo.

Para una red de tamaño $N = 11$ y un equipo con procesador de 2.3 Ghz (AMD Athlon II Dual Core P360), el tiempo de evaluación del indicador de calidad es del orden de 5 seg . Los procesos de optimización se realizaron considerando $K(1) = 20$, $\rho = 1,05$ y $N_{iter} \sim 80$, lo cual implica un orden de a lo más 19400 evaluaciones del indicador de calidad con un tiempo de cómputo asociado de 27 hrs . En la práctica, el tiempo de cómputo fue del orden de 10 hrs , lo cual es coherente con esta cota máxima y con el hecho de que normalmente el algoritmo era detenido antes de completar el total de iteraciones debido a que el indicador de calidad había alcanzado un valor asintótico. Sin bien estos tiempos son significativamente menores que el tiempo de resolución *a fuerza bruta* -del orden de 10^{16} años-, son demasiado grandes para aplicaciones eficientes en la práctica.

Dada una red inicial, nada asegura que el resultado final del algoritmo corresponda a un óptimo local o global; y, dada su naturaleza aleatoria nada asegura que para una misma red inicial los resultados finales del algoritmo sean los mismos.

La red MAX-MIN ha sido obtenida con peso poblacional nulo, ya que interesa obtener un referente de red equiespaciada sobre todo el dominio espacial de observación. El resto de las redes óptimas han sido obtenidas con peso poblacional $\beta = 0.7$.

Si bien los problemas de diseño óptimo corresponden a problemas de maximización, los gráficos de evolución de los indicadores de separación y de calidad muestran funciones decrecientes debido a que el algoritmo Recocido Simulado ha sido programado como un algoritmo de minimización.

Todos los mapas de precisión que se muestran a continuación están en escala logarítmica y son comparables entre sí, pues dependen exclusivamente de la red que describen y no del indicador de la calidad utilizado.

4.4.1. Revisión individual de las redes óptimas

Red óptima MAX-MIN con condición inicial MACAM-2009

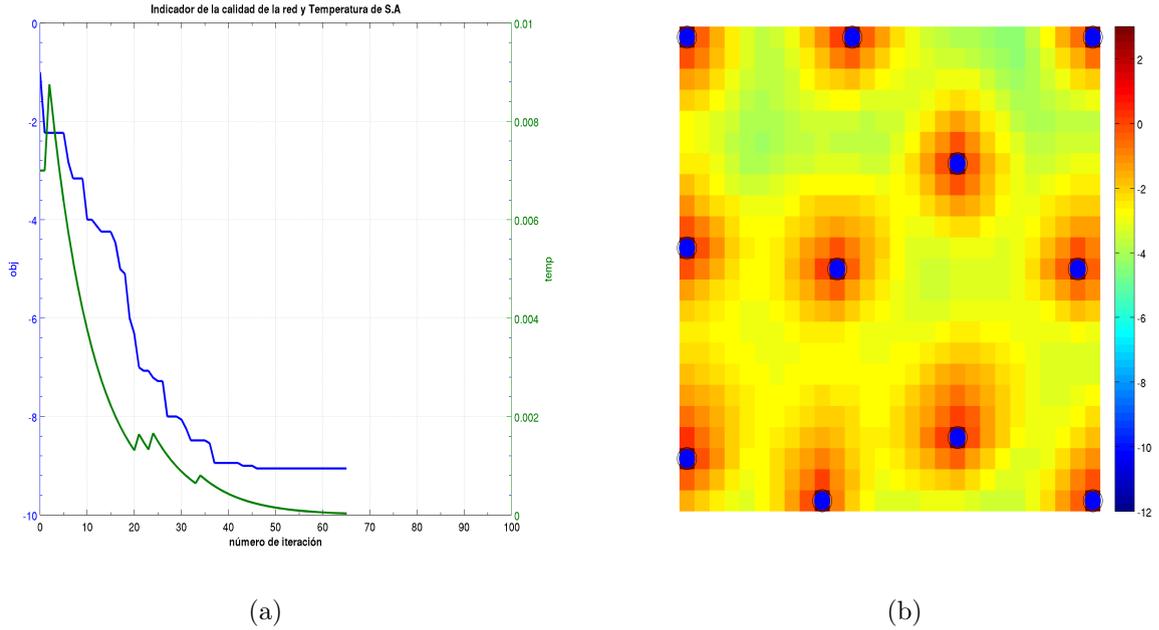


Figura 4.14: En (a) evolución del indicador de separación. La línea azul corresponde al indicador de separación a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima MAX-MIN. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

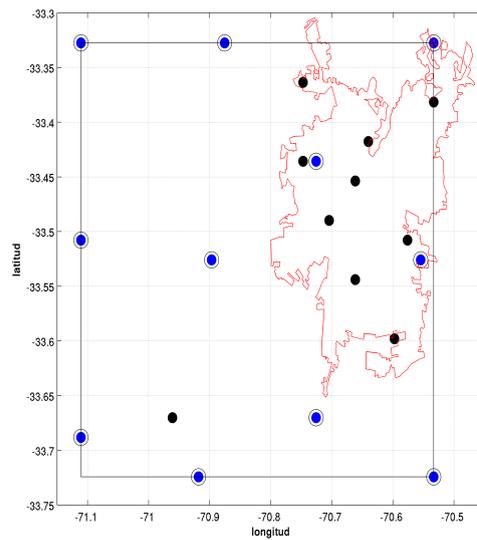


Figura 4.15: Red óptima MAX-MIN, con condición inicial MACAM-2009. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

Red óptima para el incremento de la cantidad de información con condición inicial MACAM-2009

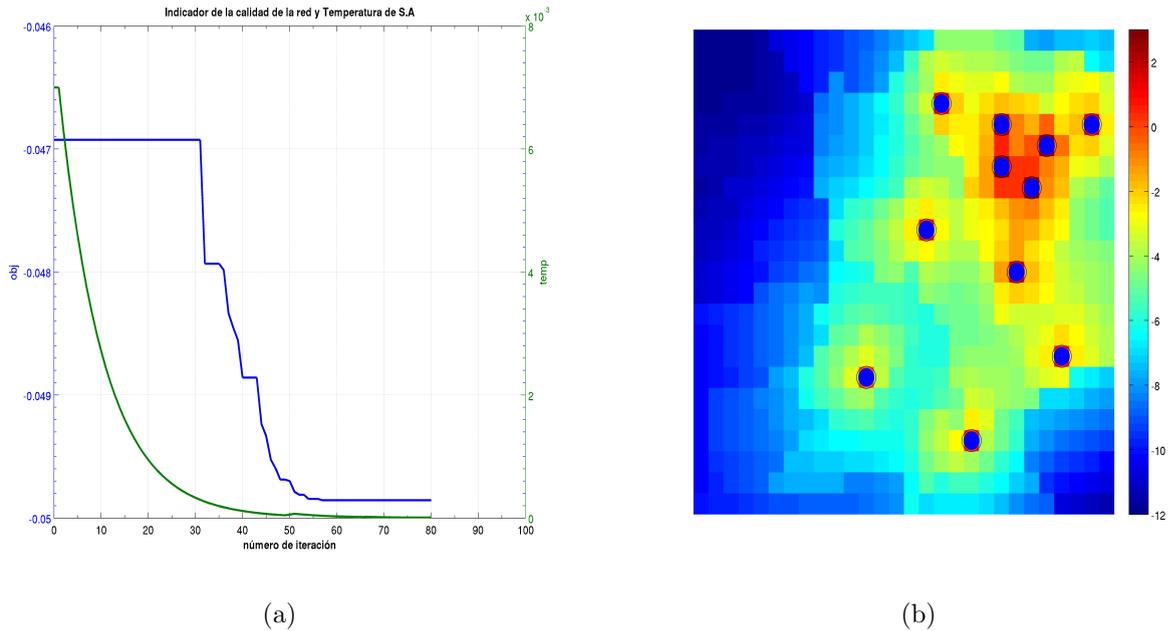


Figura 4.16: En (a) evolución del incremento de la cantidad de información. La línea azul corresponde al incremento de la cantidad de información a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

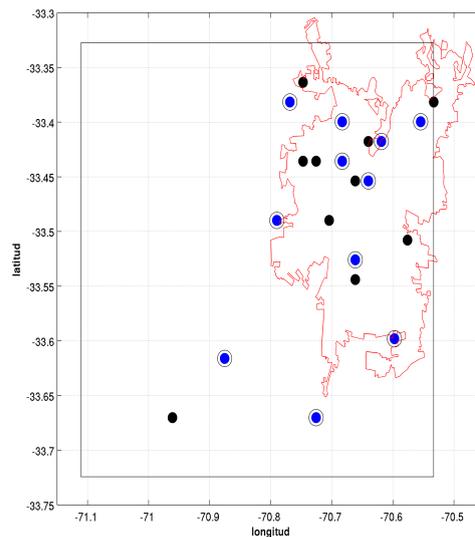


Figura 4.17: Red óptima para el incremento de la cantidad de información, con condición inicial MACAM-2009. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

Red óptima para el incremento de la cantidad de información con condición inicial MAX-MIN

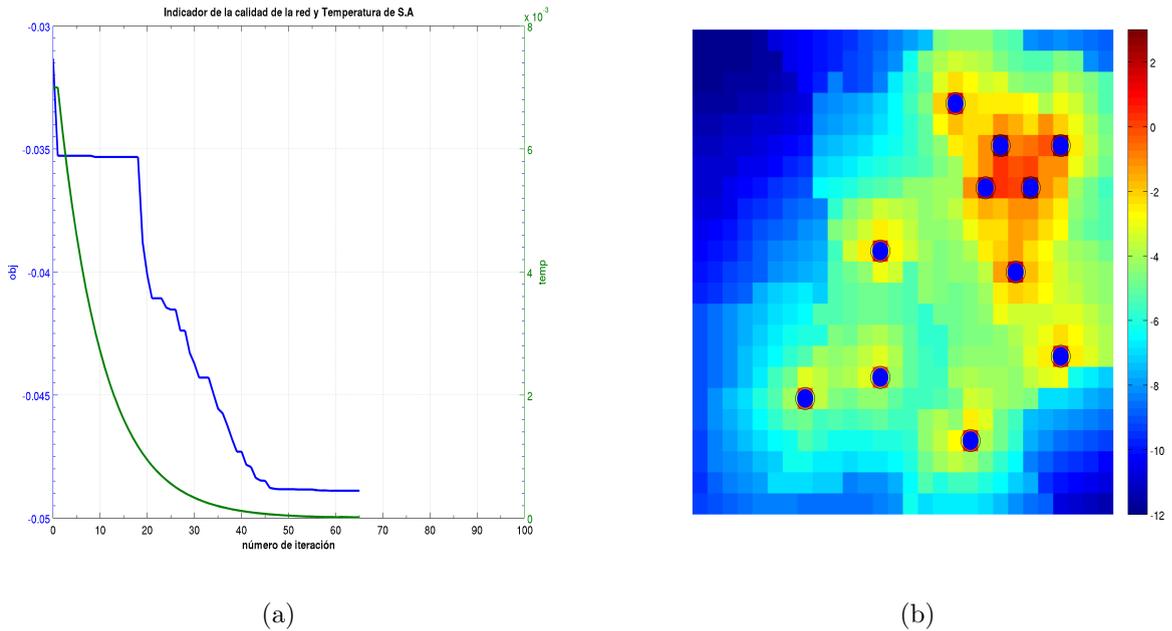


Figura 4.18: En (a) evolución del incremento de la cantidad de información. La línea azul corresponde al incremento de la cantidad de información a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

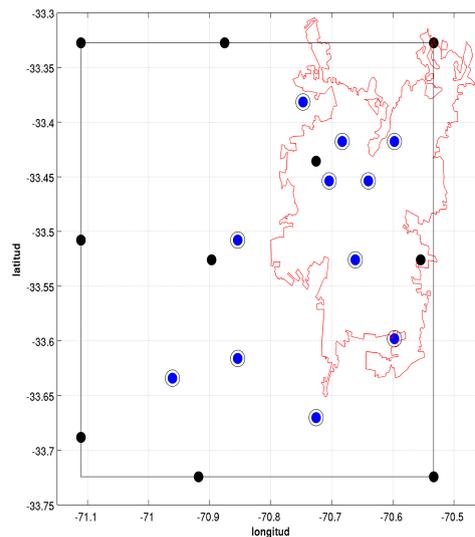


Figura 4.19: Red óptima para el incremento de la cantidad de información, con condición inicial MAX-MIN. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

Red óptima para el incremento de la cantidad de información con condición inicial RANDOM

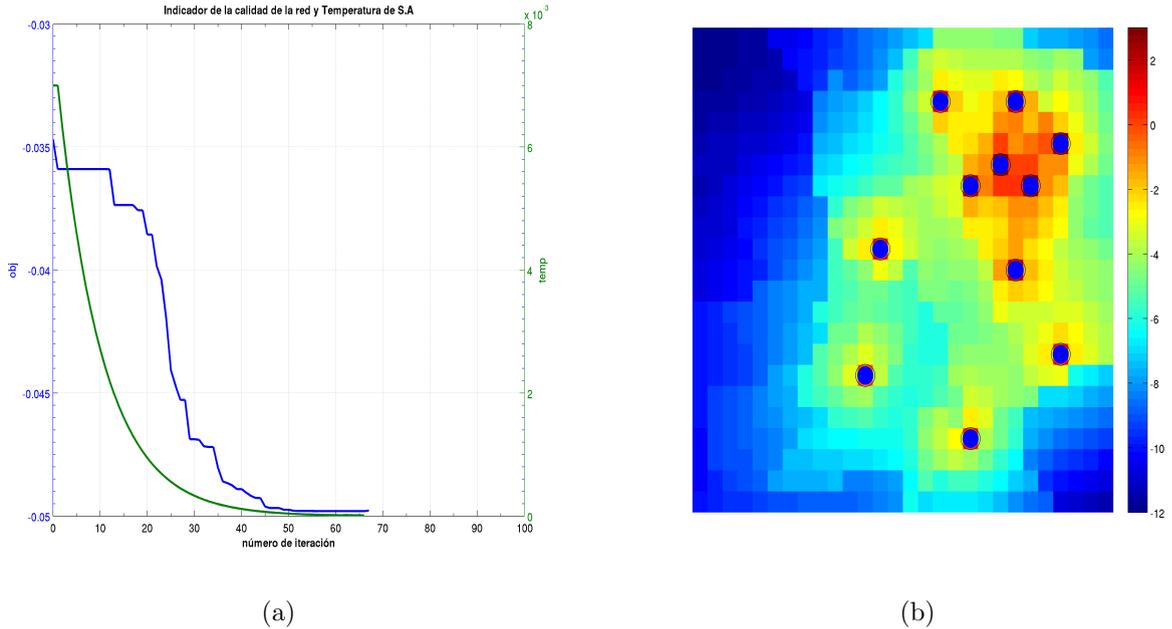


Figura 4.20: En (a) evolución del incremento de la cantidad de información. La línea azul corresponde al incremento de la calidad de información a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

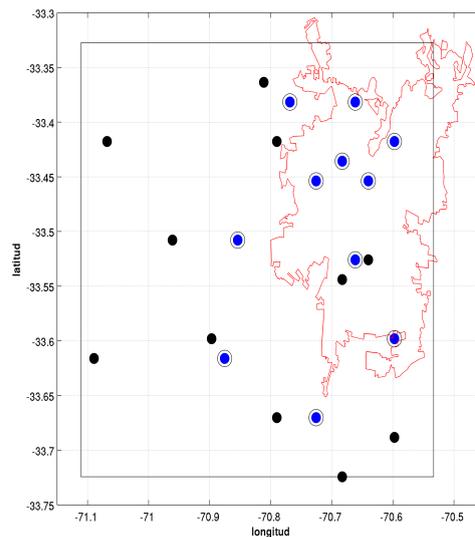


Figura 4.21: Red óptima para el incremento de la cantidad de información, con condición inicial RANDOM. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

Red óptima para los grados de libertad con condición inicial MACAM-2009

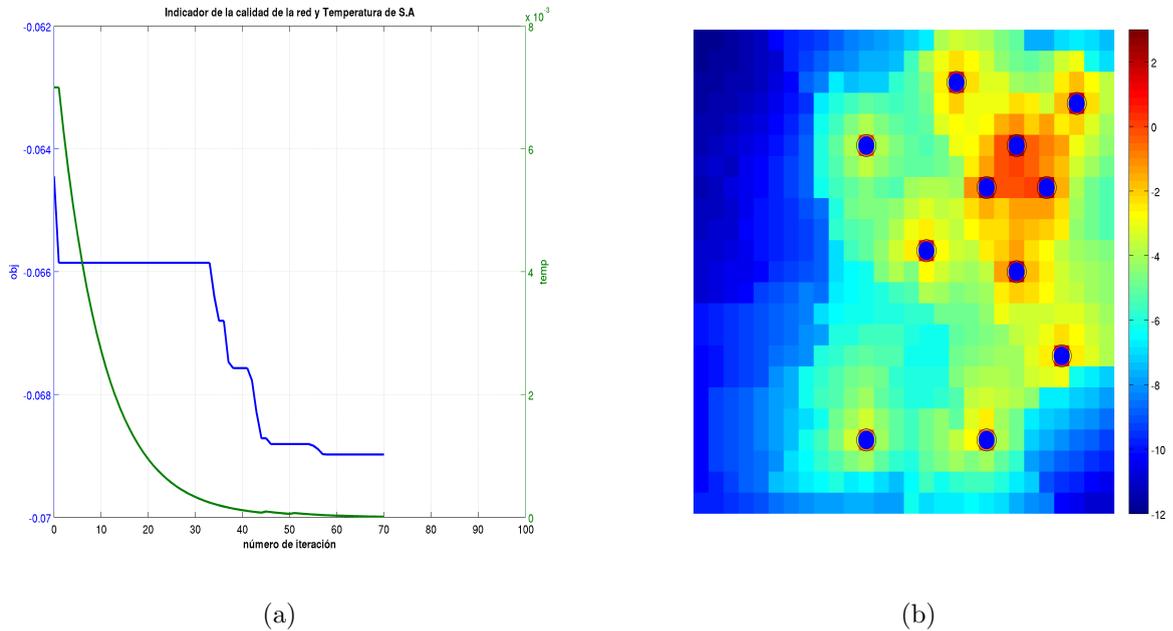


Figura 4.22: En (a) evolución de los grados de libertad. La línea azul corresponde a los grados de libertad a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

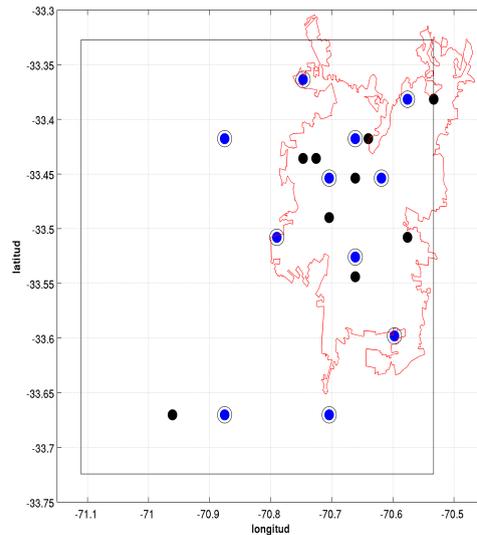


Figura 4.23: Red óptima para los grados de libertad, con condición inicial MACAM-2009. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

Red óptima para los grados de libertad con condición inicial MAX-MIN

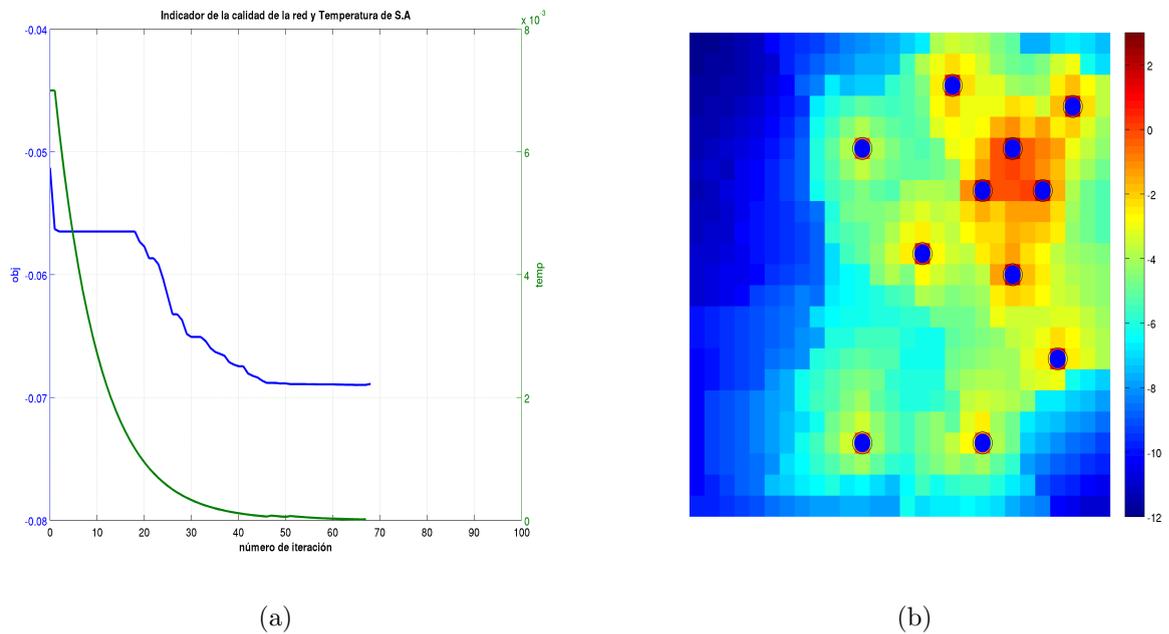


Figura 4.24: En (a) evolución de los grados de libertad. La línea azul corresponde a los grados de libertad a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

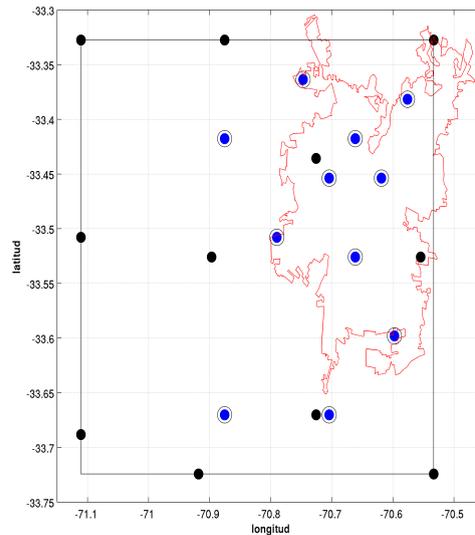


Figura 4.25: Red óptima para los grados de libertad, con condición inicial MAX-MIN. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

Red óptima para los grados de libertad con condición inicial RANDOM

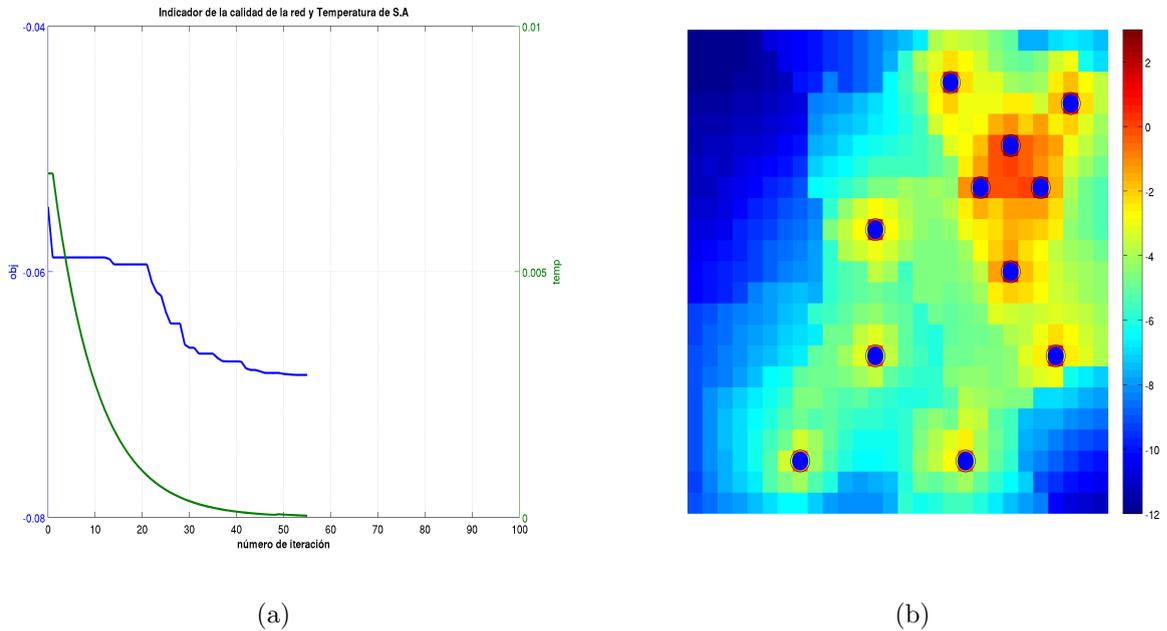


Figura 4.26: En (a) evolución de los grados de libertad. La línea azul corresponde a los grados de libertad a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

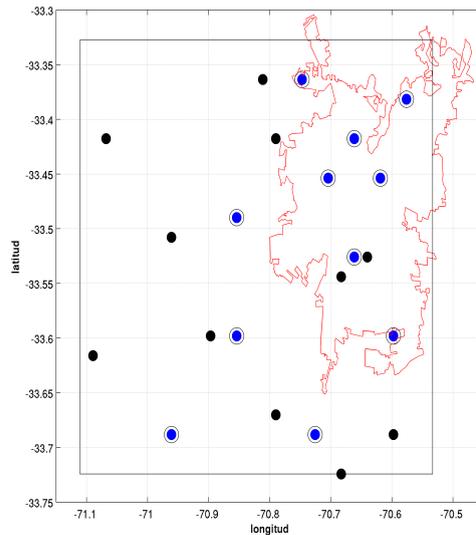


Figura 4.27: Red óptima para los grados de libertad, con condición inicial RANDOM. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

Red óptima para el rango efectivo con condición inicial MACAM-2009

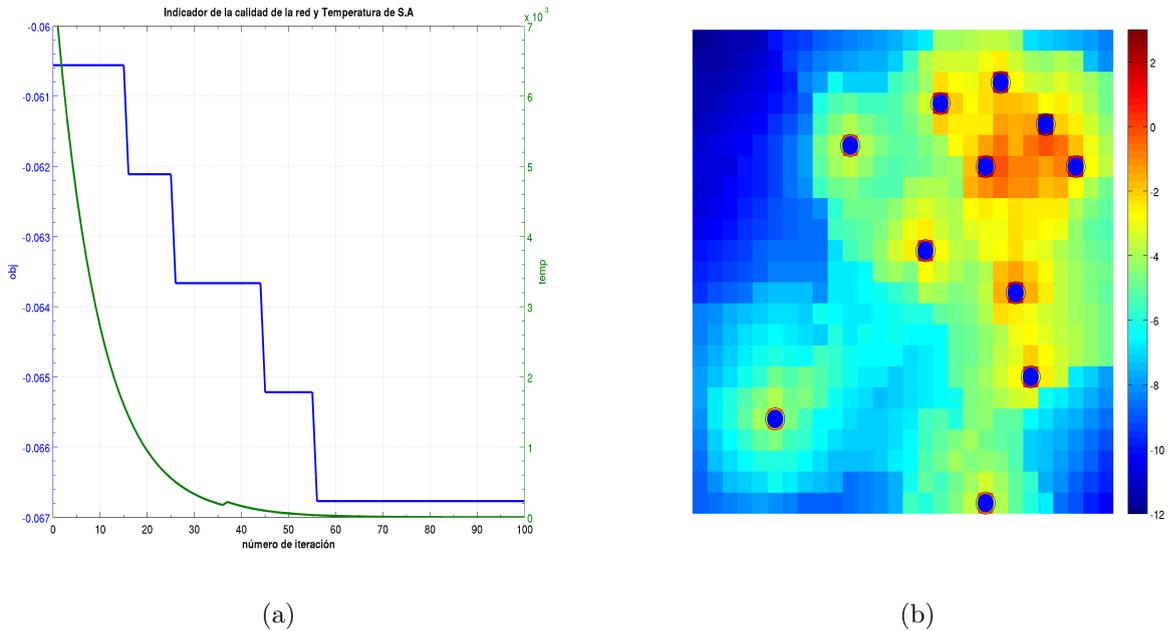


Figura 4.28: En (a) evolución del rango efectivo. La línea azul corresponde al rango efectivo a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

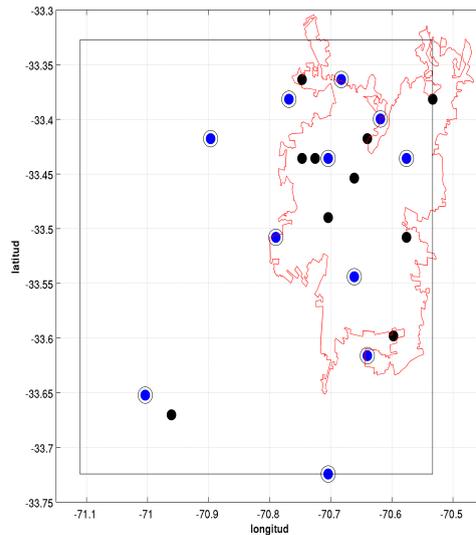


Figura 4.29: Red óptima para el rango efectivo, con condición inicial MACAM-2009. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

Red óptima para el rango efectivo con condición inicial MAX-MIN

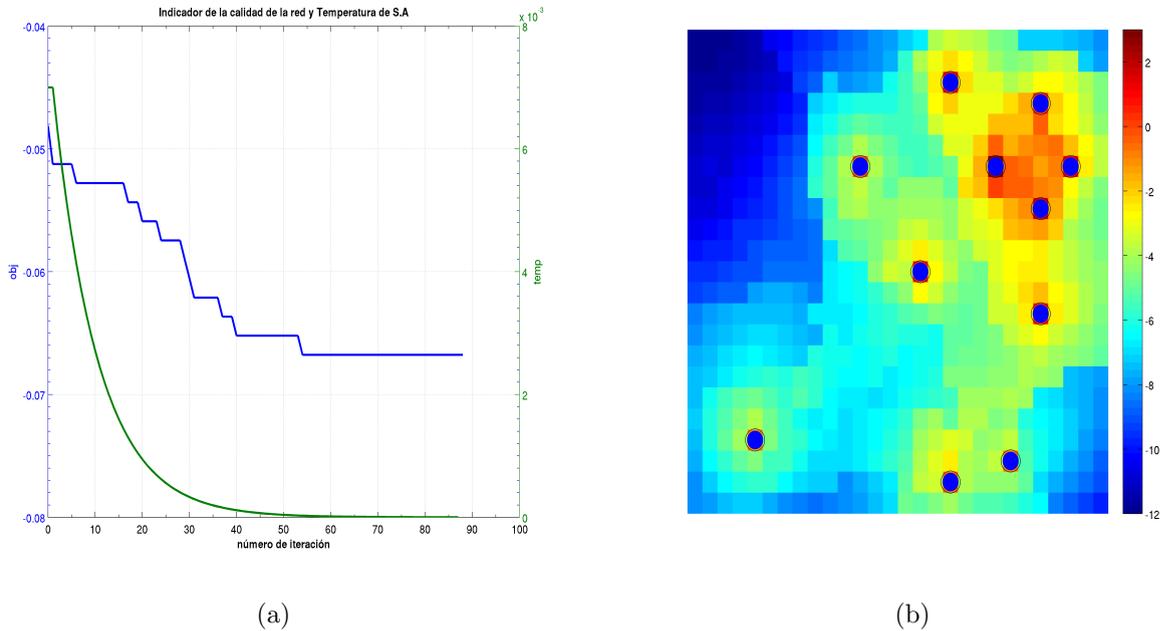


Figura 4.30: En (a) evolución del rango efectivo. La línea azul corresponde al rango efectivo a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

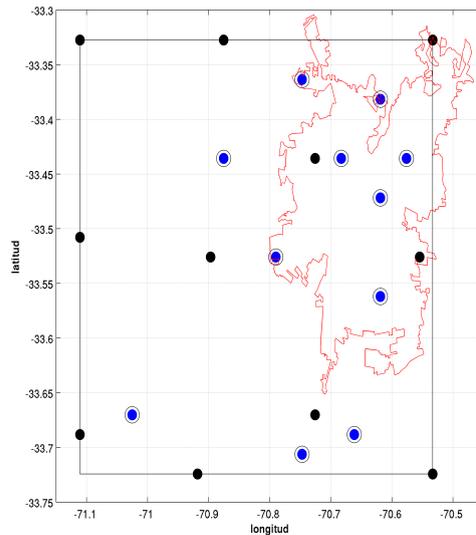


Figura 4.31: Red óptima para el rango efectivo, con condición inicial MAX-MIN. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

Red óptima para el rango efectivo con condición inicial RANDOM

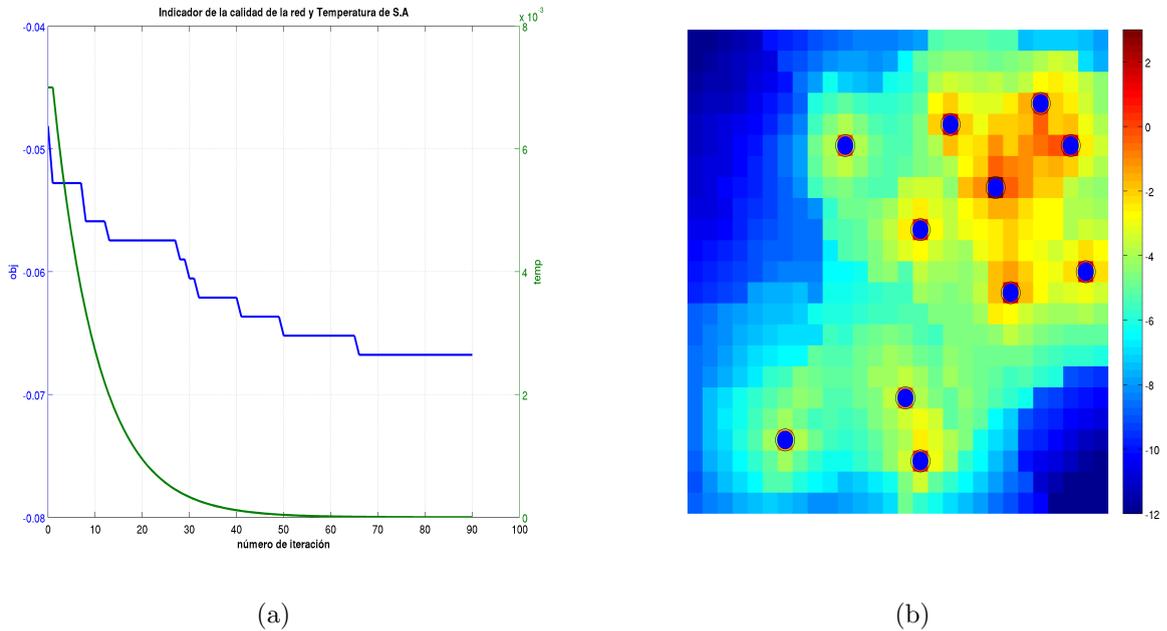


Figura 4.32: En (a) evolución del rango efectivo. La línea azul corresponde al rango efectivo a lo largo de la optimización y la línea verde corresponde a la temperatura del algoritmo a lo largo de la optimización. En (b) mapa de precisión para la red óptima. Los puntos azules corresponden a la red óptima.

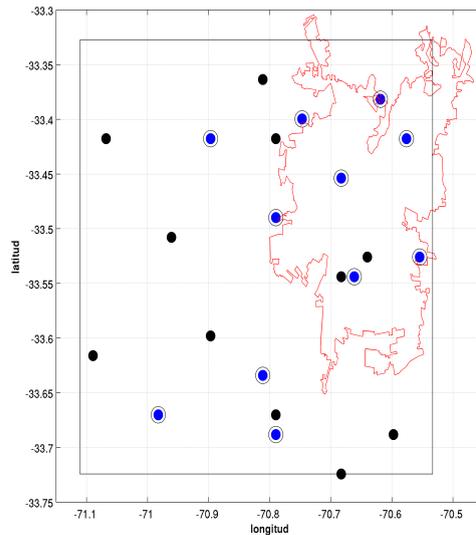


Figura 4.33: Red óptima para el rango efectivo, con condición inicial MAX-MIN. Los círculos negros corresponden a la red inicial y los círculos azules corresponden a la red óptima. La línea negra corresponde al dominio espacial de observación y la línea roja corresponde al límite urbano-rural.

4.4.2. Comparación entre redes óptimas

Describiremos, de manera simplificada, una red de monitoreo mediante su centroide y su *elipsoide de direcciones principales*. Este último concepto corresponde a un indicador geométrico de la varianza o dispersión de la red y se construye en base al análisis de componentes principales de la siguiente manera

Sea R una red de monitoreo de tamaño N . Por simplicidad en la notación denotemos $R = (x_k, y_k)_{k=1}^N$ y definamos la matriz $X = \begin{pmatrix} x_1 & \cdots & x_N \\ y_1 & \cdots & y_N \end{pmatrix}$.

Sean, respectivamente, \bar{X} y V , el promedio y varianza de X , definidas por

$$\bar{X} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^N x_k & \cdots & \sum_{k=1}^N x_k \\ N & & N \\ \sum_{k=1}^N y_k & \cdots & \sum_{k=1}^N y_k \end{pmatrix} \quad V = \frac{1}{N}(X - \bar{X})^t(X - \bar{X})$$

Sean v_1 y v_2 los vectores propios de V , de valores propios λ_1 y λ_2 . Entonces se define el *elipsoide de direcciones principales* como la elipse de semiejes principales orientados en la dirección de v_1 y v_2 , y de largo λ_1 y λ_2 .

Por otro lado, dadas dos redes de monitoreo R_1 y R_2 , se utilizó la distancia de Hausdorff como un indicador de su similitud.

Las figuras 4.34, 4.35 y 4.36 muestran que para una red inicial fija, independiente de si ésta corresponde a MACAM-2009, MAX-MIN o RANDOM, la red óptima posee orientación aproximadamente noreste, independiente del indicador de la calidad utilizado. En todos los casos los centroides de las redes óptimas tienden a estar cerca entre sí, respecto de la distancia al centroide de la red inicial. Además, se observa que el rango efectivo tiene asociadas las redes más dispersivas, respecto de los otros indicadores de calidad.

Las figuras 4.37 (a), (b) y (c), comparan la evolución de un indicador de la calidad fijo, a partir de las redes iniciales MACAM-2009, MAX-MIN y RANDOM. En todos los casos se observa convergencia del valor del indicador de la calidad, independiente de la red inicial que se considere. El rango efectivo es el indicador de la calidad que más iteraciones requiere para alcanzar la convergencia, presentando -posiblemente a causa de la naturaleza discreta de su definición- grandes dificultades para incrementar su valor a lo largo de la optimización, según lo indica el marcado escalonamiento de su evolución en la figura 4.37 (c).

Estos resultados son complementados por las figuras 4.38, 4.39 y 4.40. Se aprecia claramente que dos redes con el mismo valor del indicador de la calidad no tienen porque ser iguales. Por otro lado, para los grados de libertad, las redes óptimas obtenidas desde las redes iniciales MACAM-2009 y MAX-MIN, tienen igual centroide, igual elipsoide e igual grados de libertad. De hecho, una revisión más minuciosa permite constatar que estas redes óptimas son idénticas.

Comparación de las redes óptimas según el indicador de la calidad

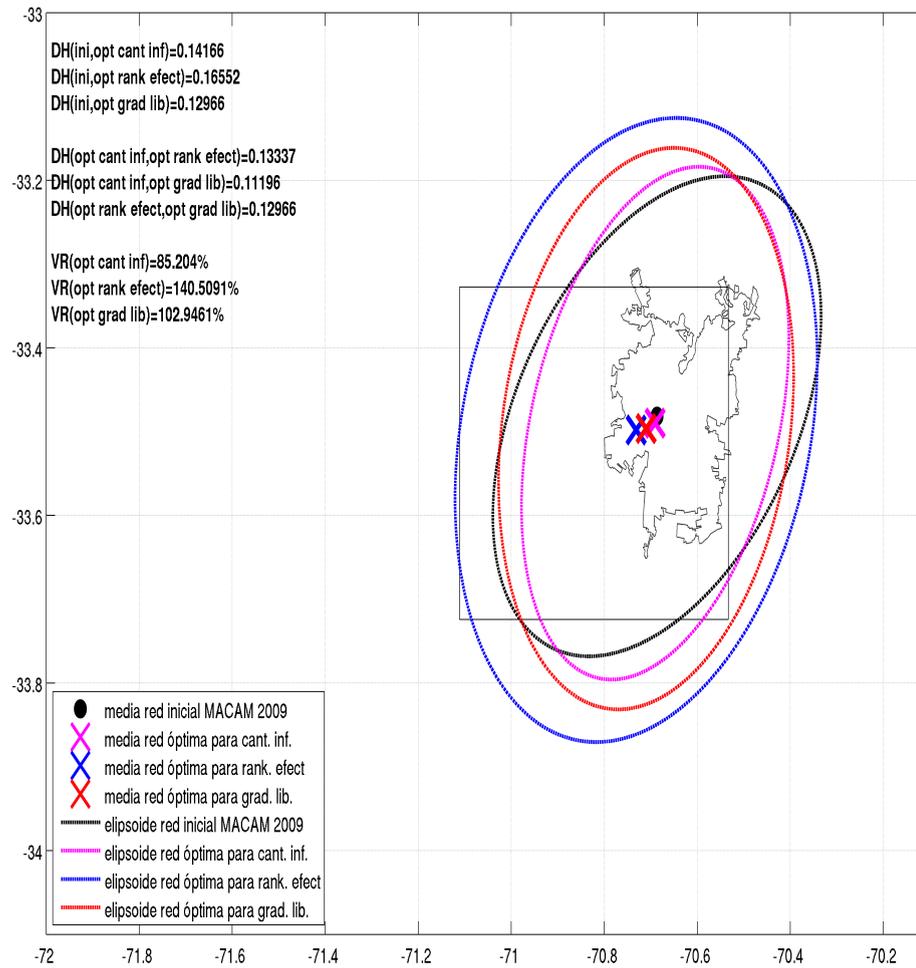


Figura 4.34: Comparación de redes óptimas, para condición inicial MACAM-2009. $DH(R_1, R_2)$ corresponde a la distancia de Hausdorff entre las redes R_1 y R_2 . $VR(R)$ corresponde a la varianza de la red R , relativa a la varianza de la red inicial.

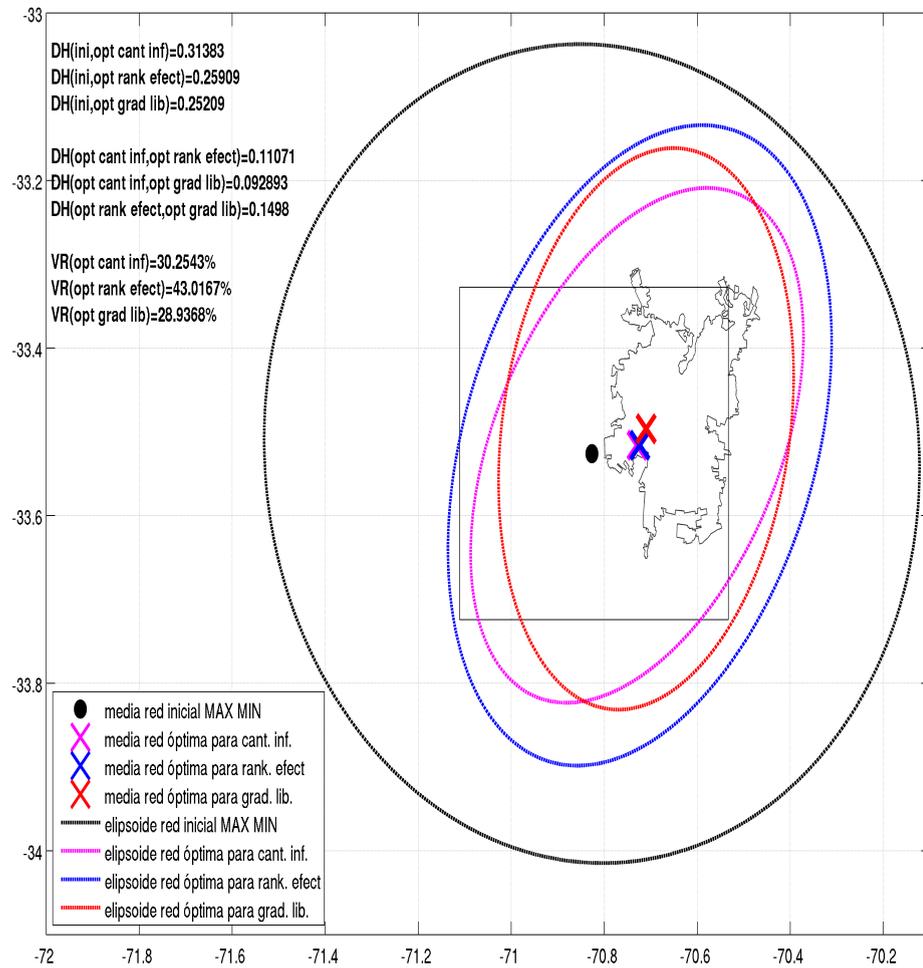


Figura 4.35: Comparación de redes óptimas, para condición inicial MAX-MIN. $DH(R_1, R_2)$ corresponde a la distancia de Hausdorff entre las redes R_1 y R_2 . $VR(R)$ corresponde a la varianza de la red R , relativa a la varianza de la red inicial.

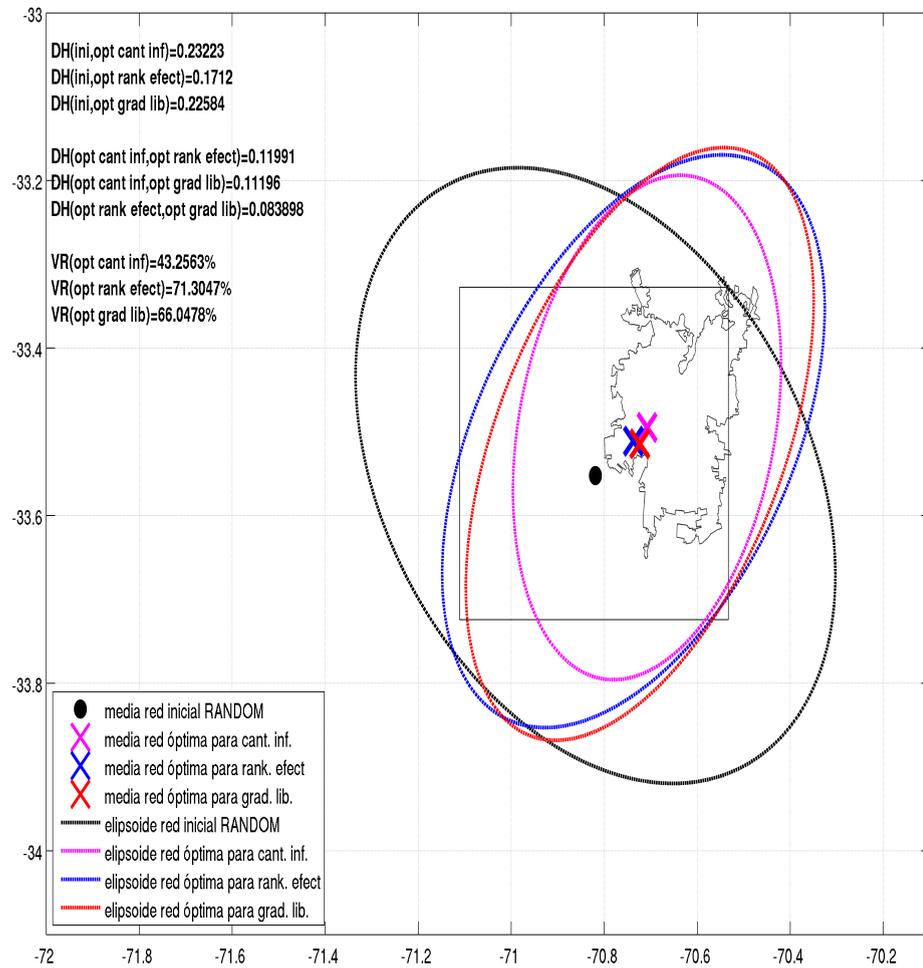
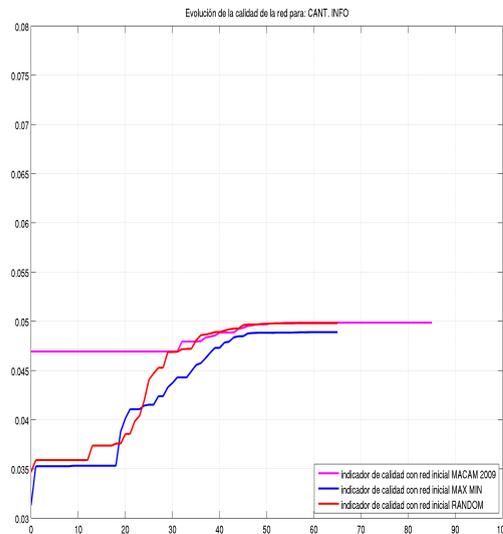
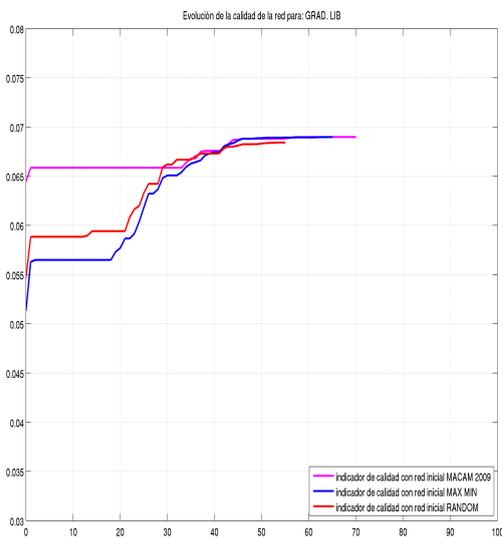


Figura 4.36: Comparación de redes óptimas, para condición inicial RANDOM. $DH(R_1, R_2)$ corresponde a la distancia de Hausdorff entre las redes R_1 y R_2 . $VR(R)$ corresponde a la varianza de la red R , relativa a la varianza de la red inicial.

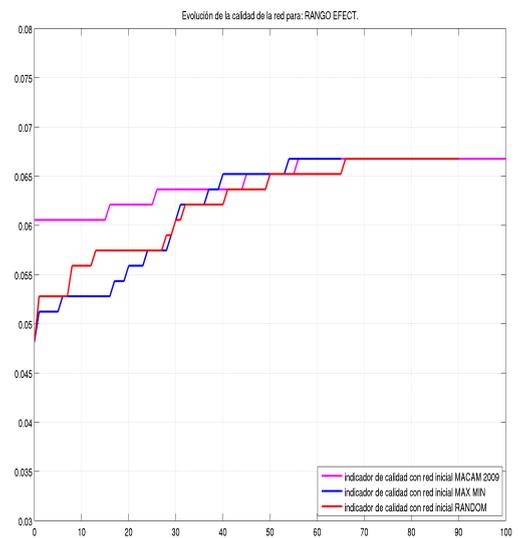
Comparación de la evolución indicador de la calidad de la red a lo largo del algoritmo Recocido Simulado según la condición inicial



(a)



(b)



(c)

Figura 4.37: Comparación de la evolución indicador de la calidad. El eje de las abscisas se muestra el número de iteración del algoritmo Recocido Simulado. El eje de las ordenadas se muestra el indicador de la calidad. En (a) el caso del incremento de la cantidad de información. En (b) el caso de los grados de libertad. En (c) el caso del rango efectivo. Los colores magenta, azul y rojo corresponden a las condiciones iniciales MACAM-2009, MAX-MIN y RANDOM, respectivamente.

Comparación de las redes óptimas según la condición inicial

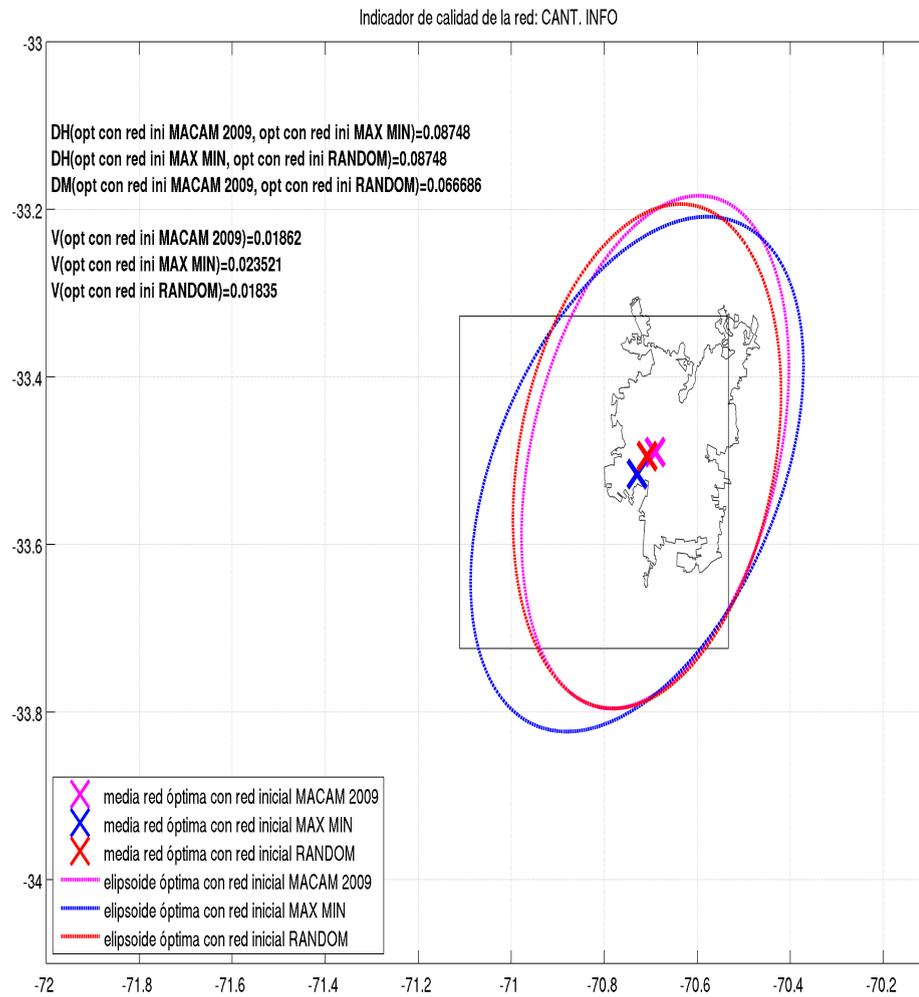


Figura 4.38: Comparación de redes óptimas, para el incremento de la cantidad de información. $DH(R_1, R_2)$ corresponde a la distancia de Hausdorff entre las redes R_1 y R_2 . $V(R)$ corresponde a la varianza de la red R .

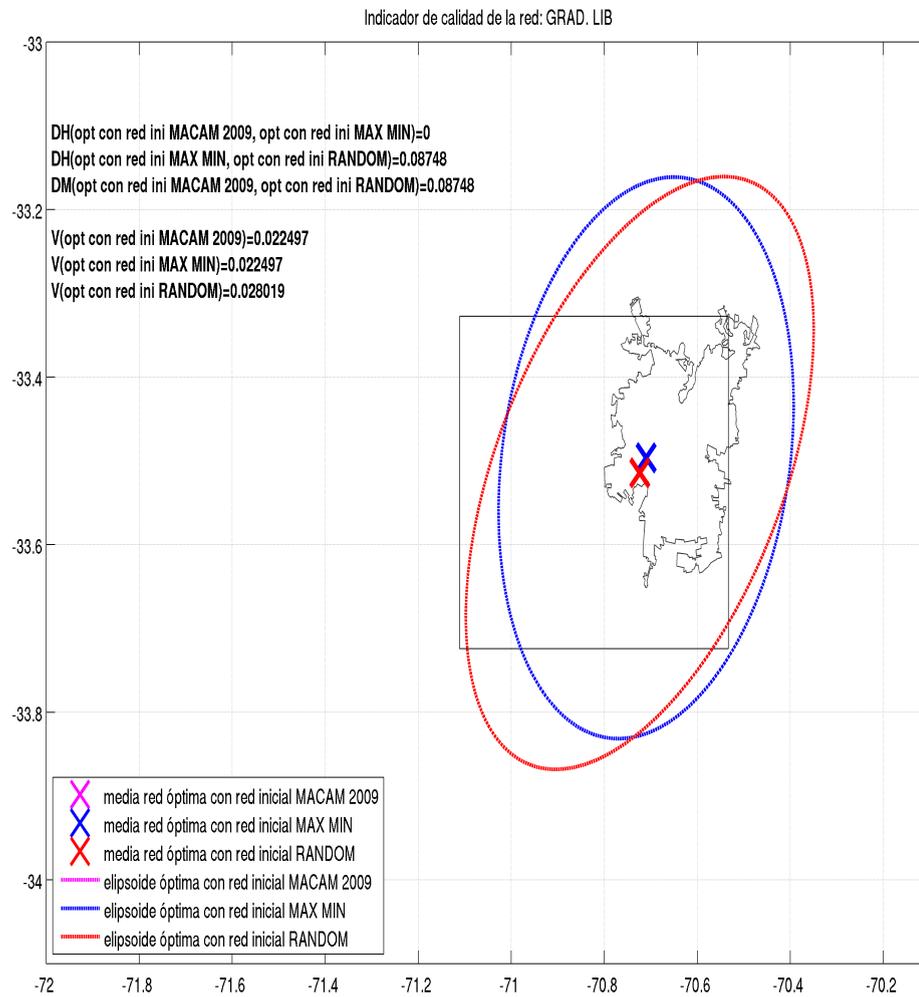


Figura 4.39: Comparación de redes óptimas, para los grados de libertad. $DH(R_1, R_2)$ corresponde a la distancia de Hausdorff entre las redes R_1 y R_2 . $V(R)$ corresponde a la varianza de la red R .

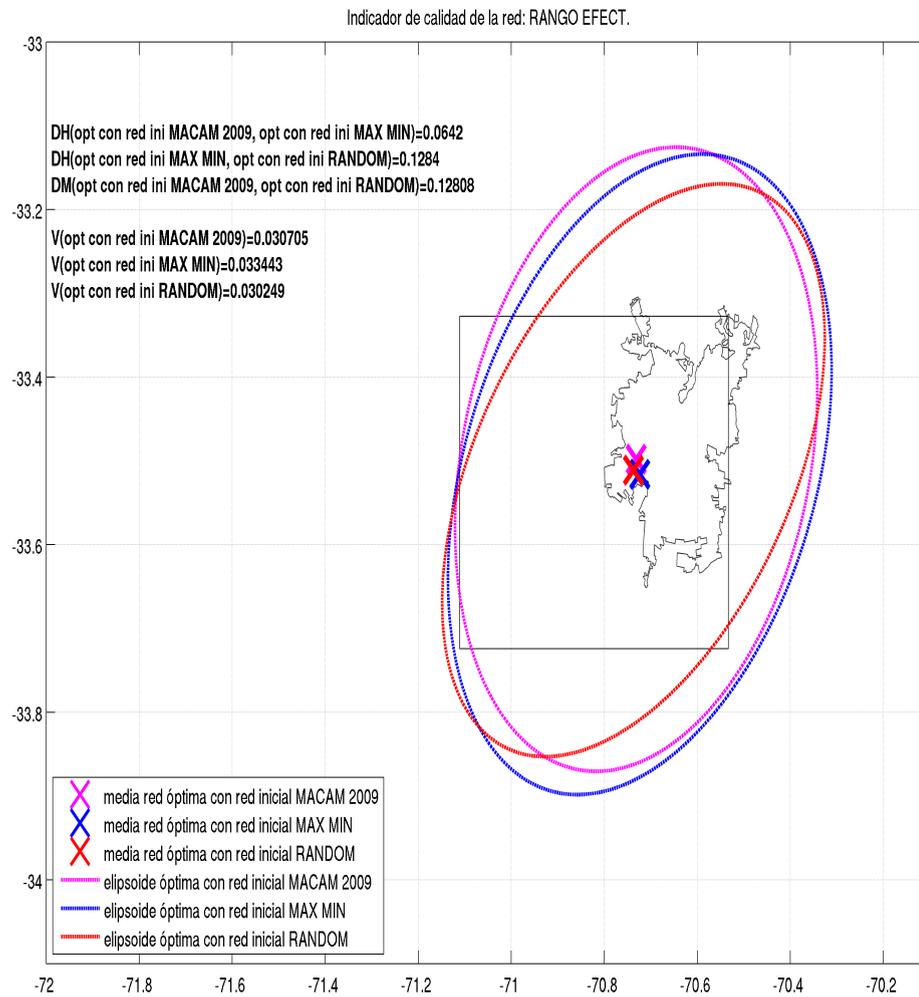


Figura 4.40: Comparación de redes óptimas, para el rango efectivo. $DH(R_1, R_2)$ corresponde a la distancia de Hausdorff entre las redes R_1 y R_2 . $V(R)$ corresponde a la varianza de la red R .

Diagrama de resumen de la comparación de redes óptimas

Representemos una red de monitoreo mediante un punto bidimensional, tal que su primera coordenada sea igual a la distancia de Hausdorff entre esta red y la red MACAM-2009, y tal que su segunda coordenada sea igual a la dirección (en grados) de su primera componente principal, medida en sentido horario con respecto a la dirección de la primera componente principal de la red MACAM-2009. Esto permite construir el diagrama de la figura 4.41, en donde han sido representadas todas las redes iniciales y óptimas asociadas a los problemas de diseño óptimo de esta sección.

Por definición la red MACAM-2009 se posiciona en el origen del diagrama. Las distancias de las redes óptimas a la red MACAM-2009 se encuentran entre 0.1 y 0.2, acotándose a valores entre 0.125 y 0.15, si no consideramos las redes óptimas para el rango efectivo. Las direcciones principales de las redes óptimas se encuentran entre 0° y -25° , con respecto a la red MACAM-2009.

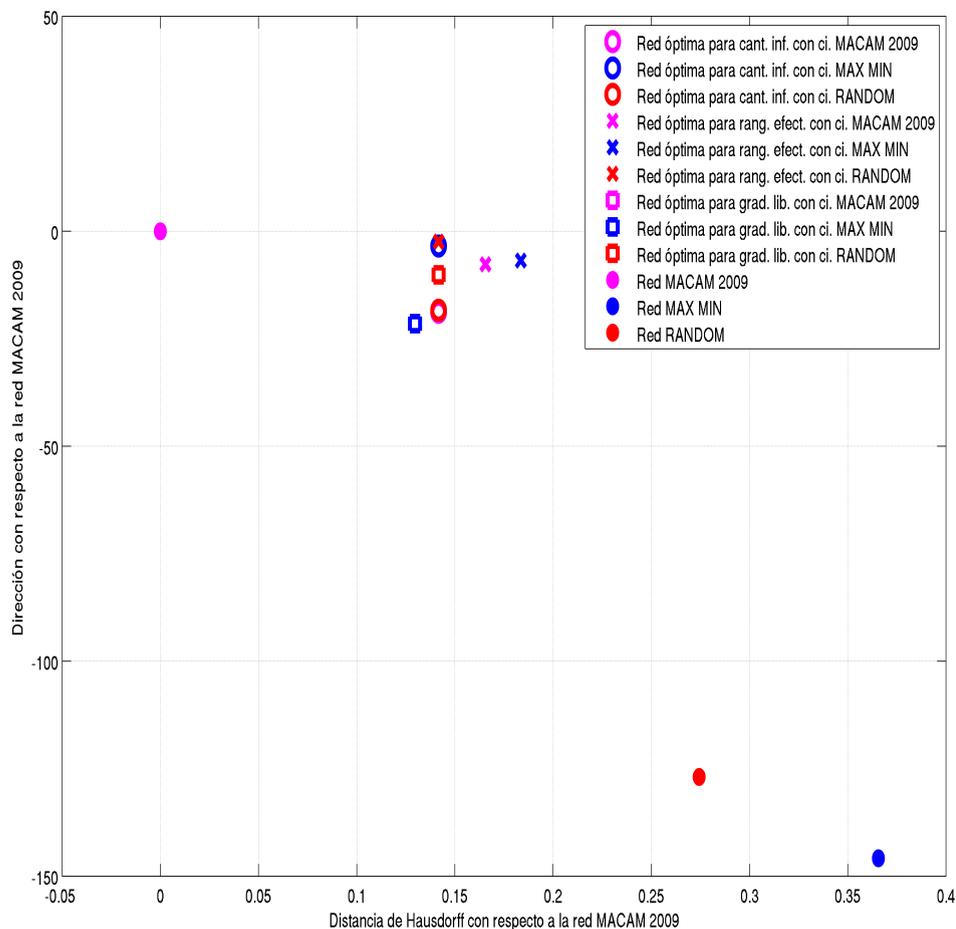


Figura 4.41: Resumen de la comparación de redes óptimas.

Capítulo 5

Conclusiones de la primera parte

5.1. Resumen de resultados obtenidos

En este trabajo se estudiaron metodologías para el diseño de redes de monitoreo de la calidad del aire, desde una aproximación variacional a la teoría de la observación, según la cual toda red de este tipo puede entenderse como un sistema de observación de las emisiones antropogénicas.

En términos matemáticos, se indicó de qué manera dicho sistema de observación se representa mediante una matriz de sensibilidad, la cual da una medida de la capacidad que posee la red para percibir perturbaciones en las emisiones. Por lo tanto, se describió de qué manera una red de monitoreo es representada por su matriz de sensibilidad.

Posteriormente se consideraron indicadores de la calidad de una red -la precisión, el incremento de la cantidad de información, el rango efectivo y los grados de libertad-, todos ellos funciones de la matriz de sensibilidad. Se probó que bajo ciertas condiciones, la precisión corresponde a una aproximación de primer orden del incremento de la cantidad de información y de los grados de libertad. Además, se explicó en qué sentido el rango efectivo y los grados de libertad son indicadores equivalentes, ambos ligados a la idea de recuperar o reconstruir una emisión que es observada parcialmente y con ruido.

Se definieron metodologías para extender una red, para reducir una red y para obtener una red óptima con respecto a un cierto indicador de la calidad. Tales metodologías pueden ser utilizadas para elaborar una planificación del desarrollo, a mediano y largo plazo, de una red de monitoreo. Además, se hizo referencia a la complejidad numérica asociada a cada uno de estos problemas, según la cual el problema de diseño óptimo requiere de un tiempo de cómputo significativamente mayor que el requerido por los problemas de extensión y reducción. Además la naturaleza discreta del problema de diseño óptimo hizo necesario considerar algoritmos de maximización heurísticos y aleatorios, como fue el caso del algoritmo Recocido Simulado.

Además, se describió cómo incorporar al diseño de redes factores externos (además de los patrones de dispersión ya considerados en la matriz de sensibilidad), como por ejemplo índices demográficos o geográficos propios del dominio de estudio. En este caso se

utilizó la densidad poblacional para considerar dentro del diseño la exposición de la población a las emisiones contaminantes.

El estudio de la extensión de la red MACAM-2009 permitió definir el peso para la densidad poblacional que se utilizaría el resto del trabajo, de manera que las regiones con mayor aumento de la calidad estuvieran, a grandes rasgos, equilibradas entre las zonas rurales y urbanas de Santiago. Todos los indicadores de la calidad utilizados en esta parte -incremento de la cantidad de información, grados de libertad y rango efectivo- muestran que las zonas de mayor aumento de la calidad corresponden a la zona rural entre la estación de Talagante y la zona urbana de Santiago, y la región poco monitoreada de la zona urbana de Santiago ubicada al oeste de la estación de Las Condes. El incremento de la cantidad de información mostró una mayor tendencia, con respecto a los grados de libertad, a incorporar estaciones de monitoreo en la zona urbana de Santiago; mientras que el rango efectivo no mostró tendencia alguna por incorporar estaciones en la zona rural o urbana de Santiago.

El estudio de la reducción de la red MACAM-2009, además de ordenar las estaciones en función de su efecto sobre la disminución de la calidad, reveló el problema de acople entre estaciones que se encuentran muy ligadas entre sí a causa, por ejemplo, de su cercanía geográfica, como fue el caso de las estaciones de Pudahuel y Cerro Navia, las cuales se encontraban en puntos adyacentes de la grilla espacial. A su vez, esto obligó estudiar de manera más general el problema de comparar los valores de un mismo indicador de la calidad, cuando son obtenidos a partir de redes de distinto tamaño.

En el estudio del diseño óptimo, el algoritmo de optimización Recocido Simulado requirió, en todos los casos, un alto tiempo de cómputo, del orden de 10 horas, para alcanzar la estabilización del indicador de la calidad. Esto motivó estudiar la posibilidad de extender de manera continua el problema de diseño óptimo (que es, en su definición original, discreto), de manera que sea factible utilizar técnicas de optimización continua que permitan alcanzar en menor tiempo el óptimo. Si bien se logró plantear de manera teórica esta extensión, los resultados prácticos se encuentran fuera del alcance de esta tesis, formando parte de las proyecciones del trabajo.

Independiente de la red inicial utilizada (MACAM-2009, MAX-MIN o RANDOM) e independiente del indicador de la calidad utilizado (incremento de la cantidad de información, grados de libertad o rango efectivo), las redes óptimas obtenidas presentan rasgos similares, en cuanto a sus centroides y a sus grados de dispersión. Esto es significativo, pues implica que, a pesar de la eventual existencia de máximos relativos, de la elección de una red inicial, de la elección de un indicador de la calidad y de la aleatoriedad del algoritmo de optimización, es posible obtener redes óptimas (o cercanas al óptimo) similares entre sí.

Los resultados de extensión, reducción y optimización indican que el rango efectivo no es un buen indicador de la calidad, debido a que por definición es demasiado insensible a los cambios en una red de monitoreo, lo cual se traduce no sólo en mapas de ganancia y disminución de la calidad muy discontinuos y poco precisos, sino que también en dificultades para incrementar el valor del rango efectivo a lo largo del proceso de maximización.

5.2. Proyecciones del trabajo

Forma parte de las proyecciones de este trabajo de tesis extender el dominio espacial utilizado con el objeto de capturar de manera más completa el complejo patrón de dispersión de la cuenca de Santiago, definir y validar indicadores de la calidad que permitan -de acuerdo a lo expuesto en la sección 3.3.2- comparar redes de distinto tamaño, evaluar la robustez del algoritmo Recocido Simulado para optimizaciones sucesivas con red inicial fija y obtener y evaluar resultados para la relajación del problema de diseño óptimo y la factibilidad de utilizar -de acuerdo a lo expuesto en la sección 3.3.4- métodos de optimización tipo gradiente para su resolución.

Parte II

Análisis de Ozonosondas en Rapa Nui

Capítulo 6

Descripción Meteorológica de la Estación de Monitoreo

A escala climatológica, las características meteorológicas de la región de estudio están determinadas por el Alta del Pacífico Suroriental (Pacific High, PH) y por la Corriente en Chorro Subtropical del Pacífico Sur (Subtropical Jet Stream, STJ). La subsidencia inducida por el PH y la estructura latitudinal de ascenso-estabilidad-descenso propia del STJ (Holton, 2004 [11]) modulan el movimiento vertical sobre la región de estudio.

En la figura 6.2 se observa que el PH afecta Rapa Nui durante todo el año, mostrando estacionalmente un desplazamiento latitudinal del orden de 5° , con un mínimo y un máximo en la intensidad de la subsidencia durante el otoño y la primavera, respectivamente. Por el contrario, el STJ afecta la isla parcialmente durante el año, mostrando desplazamientos latitudinales del orden de 20° con su posición más lejana a la isla durante verano (50°S) y su posición más cercana a la isla durante invierno (27°S). Luego, la mayor variabilidad estacional del STJ hace que sea necesario analizar su comportamiento más detalladamente, incluso a escala mensual durante los periodos de mayor variabilidad.

A lo largo del otoño el STJ se encuentra 10° al sur de Rapa Nui con valores del orden de $25\text{-}30\text{ m/s}$ en su núcleo. Sobre la isla, entre 350 hPa y 800 hPa , se observa una zona de ascenso con valores máximos del orden de $-0.5 \times 10^{-2}\text{ Pa/s}$.

A lo largo del invierno el STJ se aproxima latitudinalmente a Rapa Nui, con un máximo de intensidad de viento zonal en agosto -35 m/s según los reanálisis y 40 m/s según los sondeos- producto del posicionamiento de su núcleo sobre la isla.

La figura 6.3 muestra que en primavera las variaciones en la estructura del STJ -a diferencia de las del PH, mostradas en la figura 6.4- presentan diferencias significativas entre septiembre, octubre y noviembre, por lo cual es necesario continuar el análisis a escala mensual. En general, septiembre corresponde a un mes de transición entre las condiciones de máxima intensidad, propias de agosto, y el debilitamiento de estas condiciones en octubre. Del mismo modo en noviembre el sistema entra abruptamente en un régimen más bien característico del verano, con características muy distintas a las de septiembre y octubre.

En septiembre el núcleo del STJ está posicionado sobre la isla y su intensidad es similar a los valores invernales.

En octubre el leve desplazamiento del núcleo del STJ hacia el sur marca el inicio del movimiento que éste experimentará el hacia fines de la primavera. La intensidad disminuye abruptamente en un orden de 10 m/s , debilitando la estabilidad de la región debajo del núcleo y promoviendo descenso del orden de $0.05\text{-}0.1 \times 10^{-2} \text{ Pa/s}$.

En noviembre el STJ se desplaza abruptamente hacia el sur, desde una posición de 30°S en agosto hacia una posición de 50°S , con valores de viento zonal menores a 20 m/s sobre Rapa Nui y descenso del orden de $0.05\text{-}0.1 \times 10^{-2} \text{ Pa/s}$.

En verano el jet se encuentra en su posición más alejada de Rapa Nui, con su núcleo en 50°S . Sobre la isla hay descenso del orden de $0.05\text{-}0.1 \times 10^{-2} \text{ Pa/s}$, principalmente atribuible a la subsidencia inducida por el PH, la cual posee una intensidad intermedia entre su valor máximo de primavera y su valor mínimo de otoño

A escala sinóptica las características meteorológicas de la región de estudio están determinadas principalmente por el paso de perturbaciones baroclínicas como sistemas ciclónicos y bajas segregadas, las cuales alcanzan la isla principalmente en invierno -figura 6.1-. Una caracterización de los sistemas ciclónicos sobre el Pacífico Sur se encuentra en Keable et al, 2002 [17]; y una caracterización de las bajas segregadas sobre el Pacífico Sur se encuentra en Fuenzalida et al, 2005 [6].

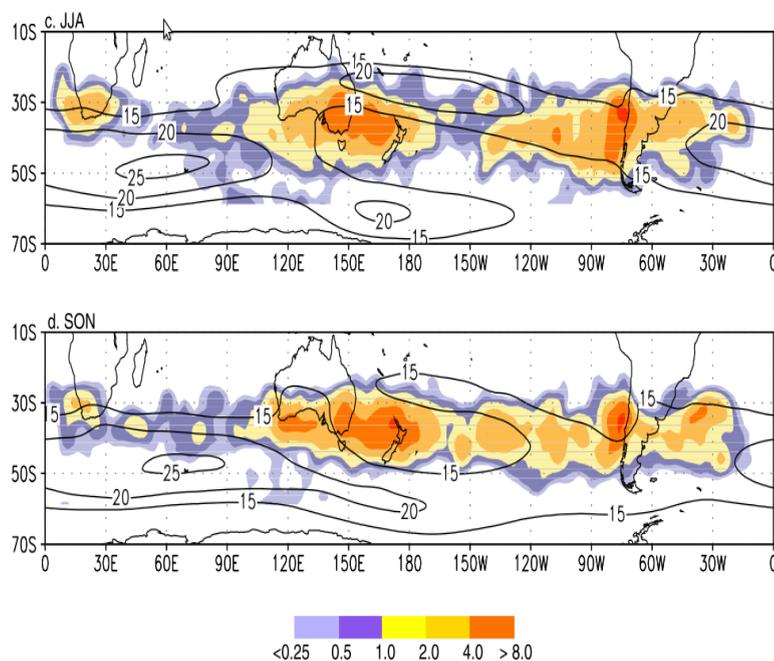


Figura 6.1: Promedio estacional del número de núcleos de bajas segregadas en una grilla de 2.5° , normalizado por área y obtenido a partir de un periodo de 31 años. Las líneas negras y continuas corresponden a la media climatológica de viento zonal en 500 hPa para la estación correspondiente. Los cuadros superior e inferior corresponden a invierno y primavera, respectivamente. Adaptado de Fuenzalida et al., 2005 [6].

En general, la estructura vertical de un sistema ciclónico muestra descenso y ascenso a la izquierda y a la derecha del eje de la vaguada, respectivamente. Típicamente el movimiento del núcleo de las perturbaciones baroclínicas es hacia el este, con velocidades medias de sus núcleos descritas en Keable et al, 2002 [17] de 8 m/s durante el invierno en el Pacífico Sur. No obstante, es posible que una baja segregada adopte velocidades distintas a las de la perturbación de la cual se desprendió, pudiendo incluso instalarse con velocidad nula en un punto específico. Por lo tanto, el movimiento vertical sobre la isla, inducido por una perturbación baroclínica, dependerá de la ubicación y movimiento del núcleo de la perturbación.

Por otro lado, la velocidad horizontal del viento en el eje de la vaguada se debilita a medida que la vaguada se agudiza, siendo de especial importancia el caso en donde una perturbación de éstas se superpone al STJ. En tal caso, el movimiento de mezcla turbulenta inducido por el STJ -debido a cizalles verticales de viento- es de menor importancia en comparación al movimiento vertical inducido por la perturbación.

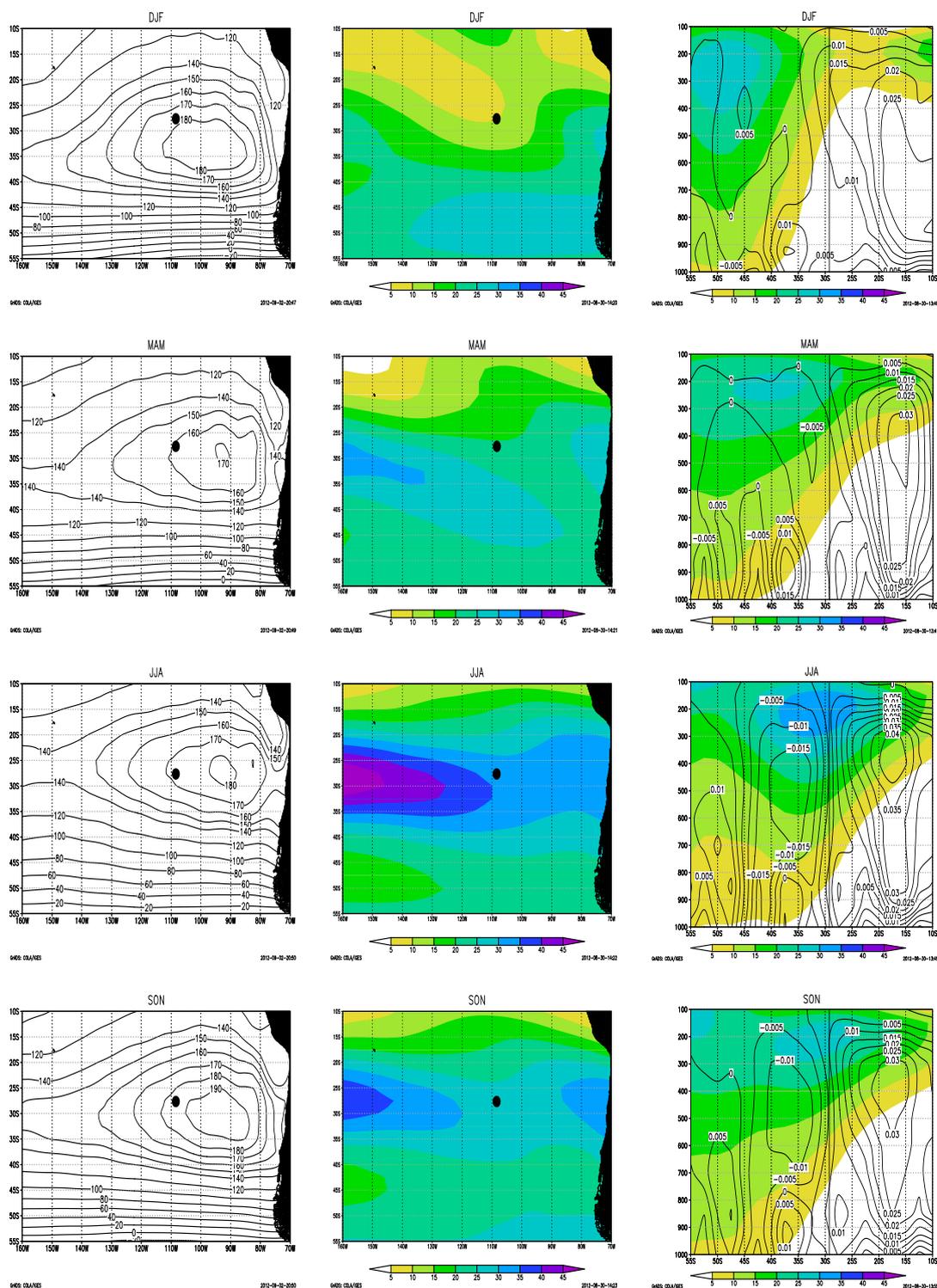


Figura 6.2: Climatología estacional del Alta del Pacífico Suroriental y el Jet Subtropical del Pacífico Sur, obtenida de los reanálisis NCEP/NCAR. En la columna izquierda los contornos negros corresponden a la altura geopotencial en m para el nivel de 1000 hPa . El punto negro indica la posición aproximada de Rapa Nui. En la columna central los colores corresponden a la magnitud del viento zonal en m/s para el nivel de 200 hPa . El punto negro indica la posición aproximada de Rapa Nui. En la columna derecha muestra

secciones longitudinales sobre Rapa Nui, en donde los contornos negros corresponden a la velocidad vertical ω en Pa/s y los colores corresponden a la magnitud del viento zonal en m/s para valores mayores a $20 m/s$. La línea negra vertical indica la posición aproximada de Rapa Nui.

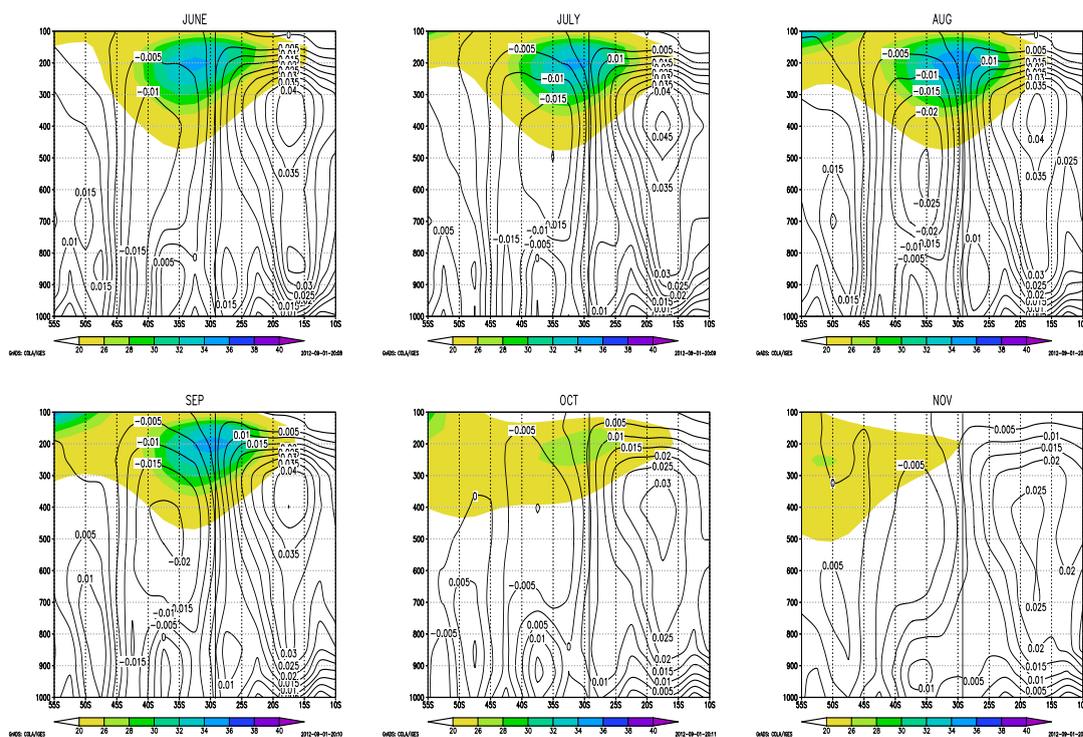


Figura 6.3: Climatología mensual de una sección longitudinal del STJ para los meses de junio, julio, agosto, septiembre, octubre y noviembre, obtenida de los reanálisis NCEP/N-CAR. Los colores corresponden a la magnitud del viento zonal para valores mayores a $20 m/s$. Los contornos negros corresponden a la velocidad vertical ω en Pa/s . La línea negra vertical indica la posición aproximada de Rapa Nui.

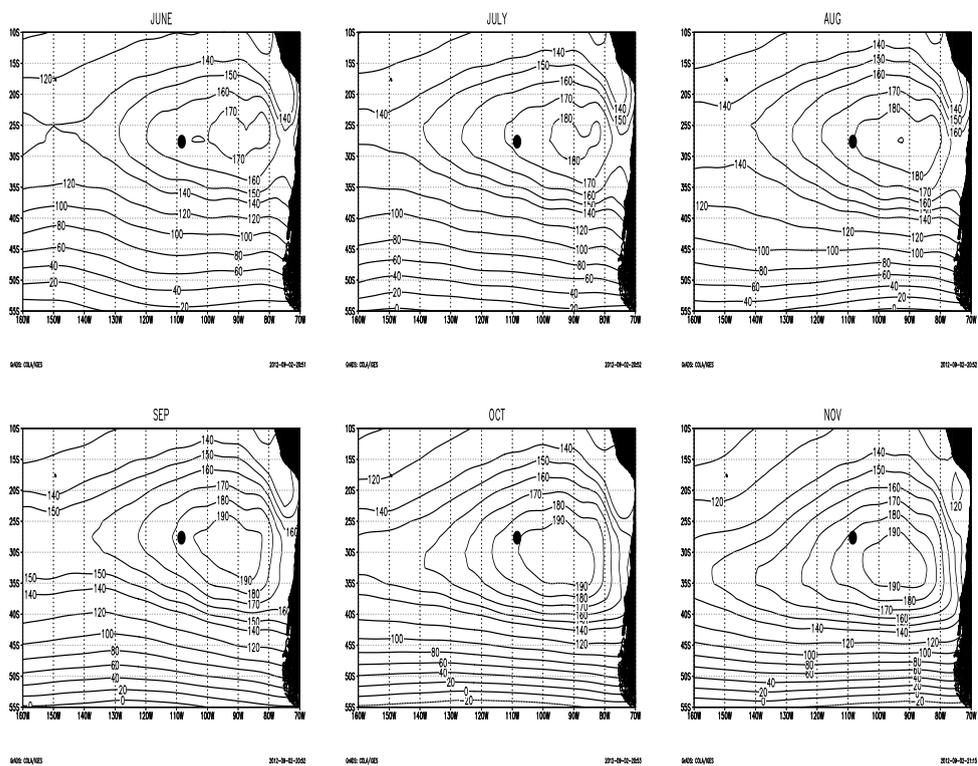


Figura 6.4: Climatología mensual del PH para los meses de junio, julio, agosto, septiembre, octubre y noviembre, obtenida de los reanálisis NCEP/NCAR. Los contornos negros corresponden a la altura geopotencial para el nivel de 1000 hPa en m . El punto negro indica la posición aproximada de Rapa Nui.

Capítulo 7

Descripción de los Datos

A mediados de los años 90, la estación de Rapa Nui fue integrada a la red de monitoreo global del programa SHADOZ (Thompson et al., 2003 [30] y [31]) (proyecto contribuyente al programa GAW, dirigido a la obtención de datos de ozono tropical y subtropical para validación satelital, procesamiento y modelación) debido a que sus bajos niveles de contaminación de origen antrópico la hacían ideal para el monitoreo de gases de efecto invernadero (Gallardo et al., 2005 [8]). Es así que desde fines de 1994 hasta el 2013 se han realizado sondeos verticales de ozono a cargo de la DMC (excepto el año 1994 en donde las mediciones estuvieron a cargo de la NASA).

Los instrumentos usados en Rapa Nui son el OS815-N (desde octubre de 1994 hasta 1997) y el sensor de ozono CCE 64B (desde 1998 hasta 2013). Este último corresponde a una Celda de Concentración Electroquímica, la cual ha sido adosada a un radiosonda Microcora Vaisala modelo RS 80-15 GE de sondeo automático que realiza mediciones de presión, temperatura, temperatura de punto de rocío y humedad relativa. Para mayor información de los dispositivos de medición referirse a Cuevas, 2006 [2].

En este estudio, de acuerdo a la información disponible, se utilizaron 210 sondeos realizados desde agosto de 1994 a diciembre de 2010, en principio con información hasta aproximadamente los 35 *km*. Las variables disponibles son altura, presión, temperatura, temperatura de punto de rocío, humedad relativa y ozono. Además, los 100 ozonosondas disponibles a partir de 1999 cuentan con datos de velocidad del viento.

La figura 7.1 muestra la serie de tiempo del número de sondeos. En el periodo 1995-1997 se observa la mayor frecuencia de sondeos, en el periodo 2000-2003 se observa la menor frecuencia de sondeos -debido a restricciones presupuestarias- y en el periodo 2004-2010 se observa una frecuencia intermedia de sondeos. Estacionalmente -de acuerdo a la figura 7.2- el número de sondeos es mayor en los meses de invierno y menor a finales de la primavera y principios de verano.

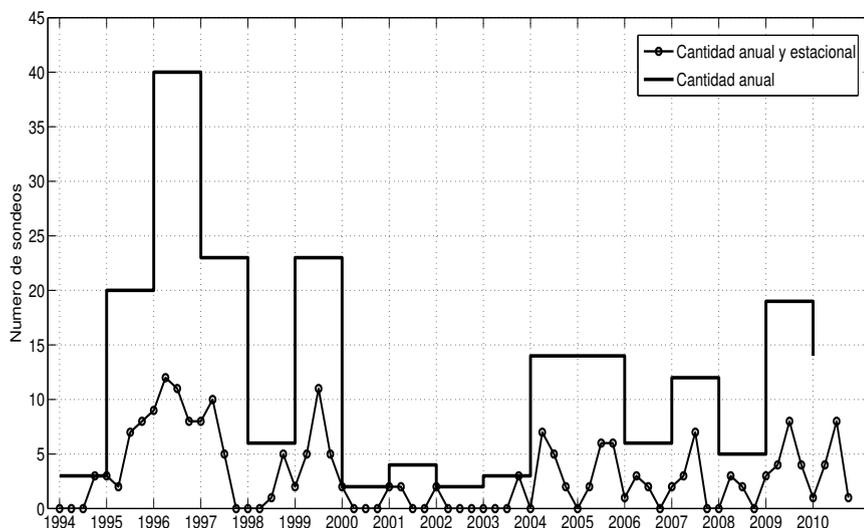


Figura 7.1: La línea negra, gruesa y continua corresponde al número anual de sondeos. La línea negra, delgada y continua corresponde al número anual de sondeos, separado en las estaciones verano, otoño, invierno y primavera. Por convención el año asociado a un verano será el correspondiente a su mes de enero.

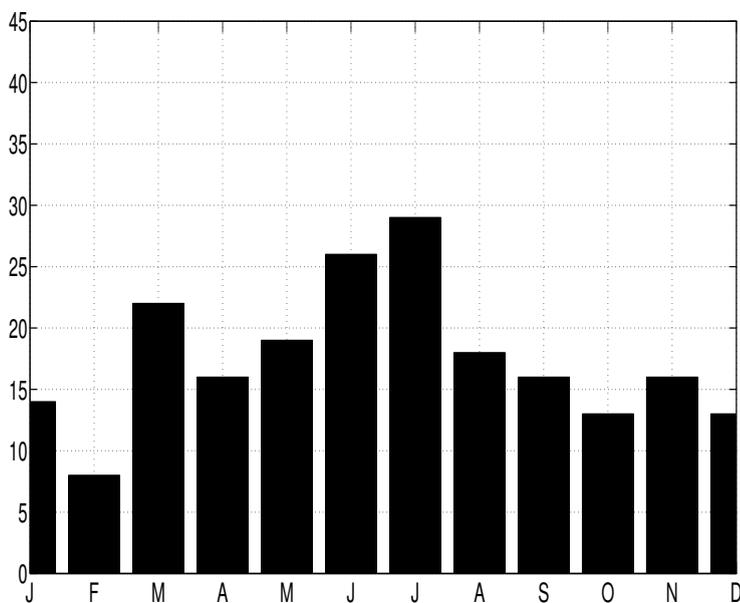


Figura 7.2: Histograma mensual del número de sondeos. Periodo de fines del año 1994 hasta el año 2010.

Capítulo 8

Metodología

La metodología utilizada en esta investigación tuvo las siguientes etapas:

1. Revisión, limpieza e interpolación de los datos

Se realizó una inspección visual de cada uno de los 210 sondeos, observando los perfiles de ozono, temperatura, viento zonal y viento meridional.

Se aplicó el siguiente criterio de eliminación global de los datos: un sondeo cuyo perfil de ozono presente rasgos evidentemente anómalos -indicadores de fallas en el dispositivo de medición- será inmediatamente descartado. Un sondeo cuyo perfil de ozono presente rasgos anómalos -pero no inmediatamente atribuibles a fallas en el dispositivo de medición- será descartado en función de la coherencia física entre sus perfiles de ozono, temperatura, viento zonal y viento meridional. Si este criterio permite concluir que el rasgo anómalo del perfil de ozono corresponde efectivamente a una falla en el dispositivo de medición, entonces el sondeo será descartado. Finalmente se realizó una eliminación parcial de los datos, descartando en los perfiles de ozono, temperatura, viento zonal y viento meridional los tramos verticales -típicamente en la base o en el tope del sondeo- que presentaban anomalías de menor gravedad.

El conjunto de sondeos resultante de este proceso de eliminación se interpoló linealmente cada 100 *m* -en concordancia con el procedimiento análogo realizado por Jensen et al., 2012 [14]- en el rango 0.5-35 *km*. Se verificó la coherencia entre los perfiles y sus correspondientes interpolaciones, pues podría darse -principalmente en perfiles admisibles pero irregulares- que la interpolación introdujera rasgos ficticios al perfil.

Este procedimiento concluyó con un total de 186 sondeos con perfiles de ozono admisibles.

Posteriormente, se observó la distribución vertical de los datos faltantes de cada sondeo -figura 8.1- y la distribución temporal de los sondeos -figuras 8.2 y 8.3- con el objeto de identificar la frecuencia de lanzamientos y la distribución estacional de éstos.

Notemos que sobre los 20 *km* hay un aumento significativo de la cantidad de datos faltantes en los perfiles de ozono y que en el año 1995 hubo una serie de sondeos sistemáticamente defectuosos -figuras 8.1 y 8.2-. De acuerdo a la figura 8.3, la menor frecuencia de sondeos es a finales de la primavera e inicios del verano y la mayor frecuencia de sondeos es en invierno. El menor número de eliminaciones completas de sondeos es a finales del otoño y principios del invierno, y el mayor número de eliminaciones completas de sondeos es en primavera.

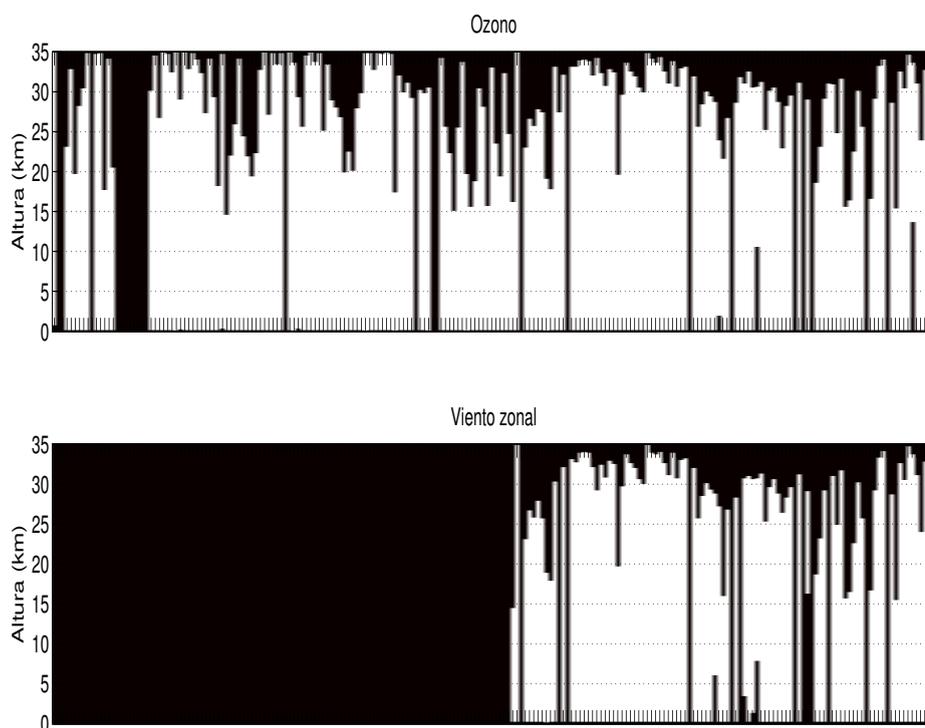


Figura 8.1: En negro se muestra la distribución de valores faltantes de los perfiles de ozono y viento zonal.

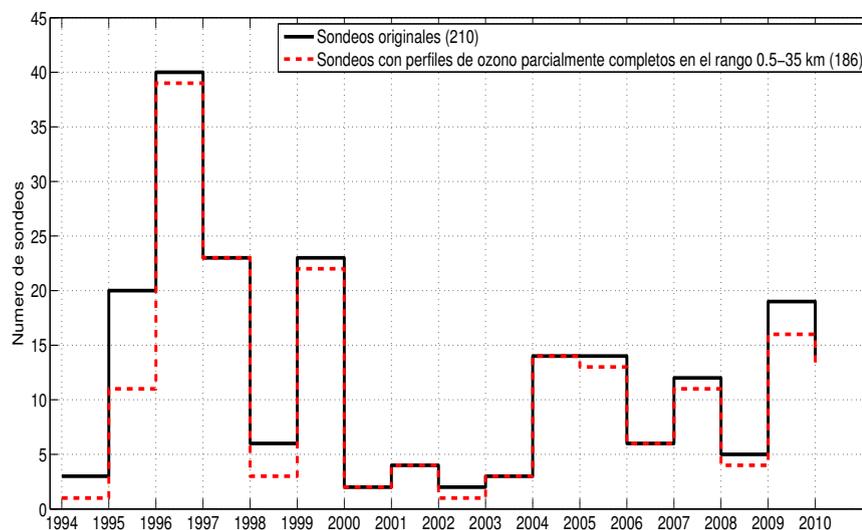


Figura 8.2: La línea negra continua y la línea roja segmentada corresponden al número de sondeos originales y al número de sondeos con perfiles de ozono admisibles, respectivamente.

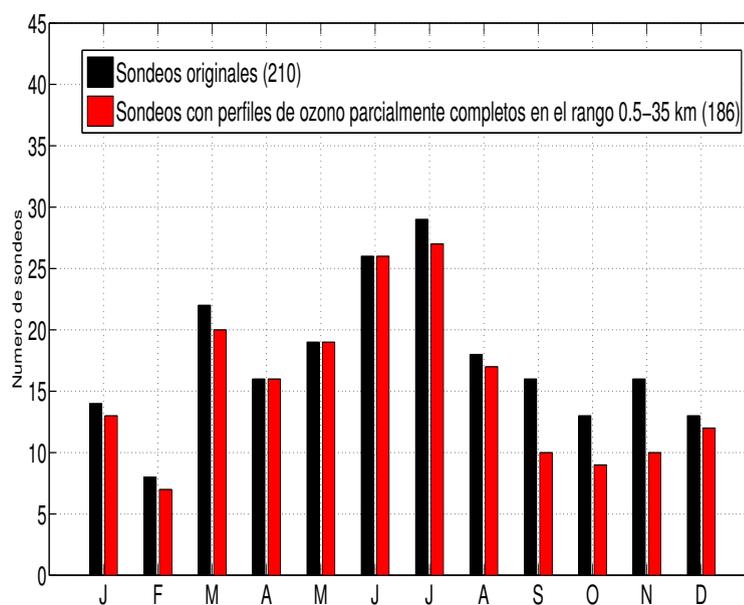


Figura 8.3: En negro se muestra el histograma del número de sondeos originales y en rojo se muestra el histograma del número de sondeos con perfiles de ozono admisibles.

2. Análisis estadístico clásico de los datos

Se generaron ciclos mensuales, agrupamientos estacionales y análisis de tendencias de las variables de interés a partir de la información entregada por los sondeos. Paralelamente y cuando resultó necesario, se complementaron y/o validaron estos resultados con los datos meteorológicos disponibles en los reanálisis NCEP/NCAR.

Finalmente se realizaron agrupamientos de los datos -con el objeto de detectar una eventual estructura interna sin el prejuicio de hipótesis asociadas a estacionalidades o a mecanismos meteorológicos- en base al análisis de componentes principales -o ACP- y al método k-means.

Al final de esta etapa se formularon las primeras hipótesis acerca de los mecanismos determinantes de la estructura del ozono troposférico en la región de estudio. En particular se identificaron las escalas vertical y temporal asociadas a cada uno de estos mecanismos.

3. Análisis SOM

Se realizó un agrupamiento de los datos en base al algoritmo SOM. Los parámetros propios del algoritmo se determinaron en base a la información entregada por los métodos de clasificación de la etapa anterior y de investigaciones análogas realizadas por Jensen et al. 2012, [14].

Los 3 métodos de clasificación que se utilizaron -ACP, k-means y SOM- se relacionan entre sí de manera creciente en cuanto a su complejidad. Esto se debe a que los resultados del método ACP se pueden utilizar para inicializar el algoritmo k-means y a que el algoritmo SOM es, en un cierto sentido, una generalización estocástica del k-means -Trosset, 2008 [32]-. Por lo tanto, el uso sucesivo de estos tres métodos permite estudiar la robustez de la clasificación.

4. Con los resultados de estos análisis se reevaluaron las hipótesis formuladas en el análisis estándar, se elaboraron propuestas finales de mecanismos que explican -al menos parcialmente- la estructura del ozono troposférico en la región de estudio y se definieron las características que un futuro muestreo debería tener para verificar la validez de dichos mecanismos.

Capítulo 9

Resultados

9.1. Climatología tradicional

La figura 9.1 muestra los ciclos anuales de razón de mezcla de ozono y viento zonal en Rapa Nui obtenidos a partir de los datos de los sondeos.

El ciclo anual de razón de mezcla de ozono muestra una variabilidad estacional en la tropósfera baja (1000 *hPa* a 800 *hPa*), con una disminución y un aumento de la razón de mezcla durante las estaciones de verano e invierno, respectivamente.

En la tropósfera media-alta (800 *hPa* a 200 *hPa*) la razón de mezcla disminuye a principios de otoño y aumenta sostenidamente a lo largo del invierno para alcanzar su máximo valor anual en octubre. Posteriormente, en noviembre se observa una abrupta disminución de la razón de mezcla a valores del orden de la media anual. La tropopausa, definida químicamente como la superficie de 100 *ppbv*, presenta variaciones en su altura, con un leve ascenso en otoño y un leve descenso en primavera, concordantes con las variaciones en la tropósfera media-alta recién mencionadas.

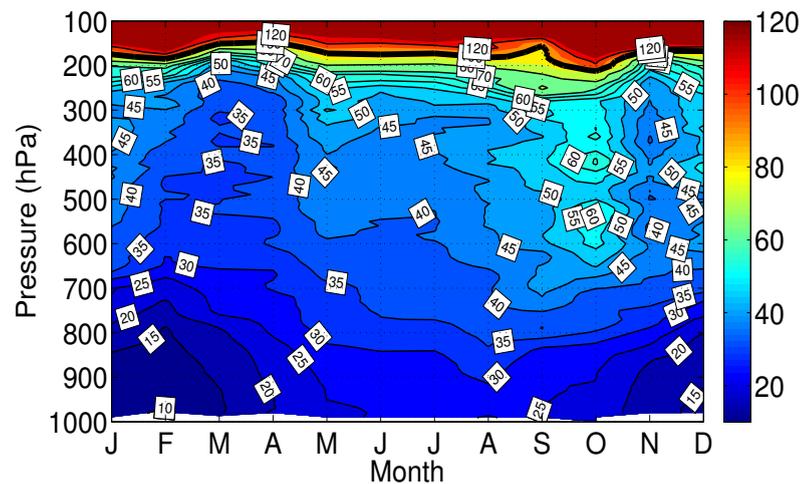
En la zona de intercambio tropósfera-estratósfera (200 *hPa*) el ciclo anual de viento zonal muestra un aumento sostenido de la intensidad del STJ a lo largo del invierno -con un máximo en agosto- y una posterior disminución de su intensidad a lo largo de la primavera, especialmente abrupta en los meses de octubre y noviembre. La comparación de este ciclo anual con su análogo obtenido a partir de los reanálisis NCEP/NCAR indica que los datos de los sondeos reproducen apropiadamente el comportamiento del STJ, en particular coincidiendo en la variación temporal de su núcleo.

Destaca el desfase temporal existente entre el máximo de intensidad del STJ (agosto) y el máximo de ozono (octubre).

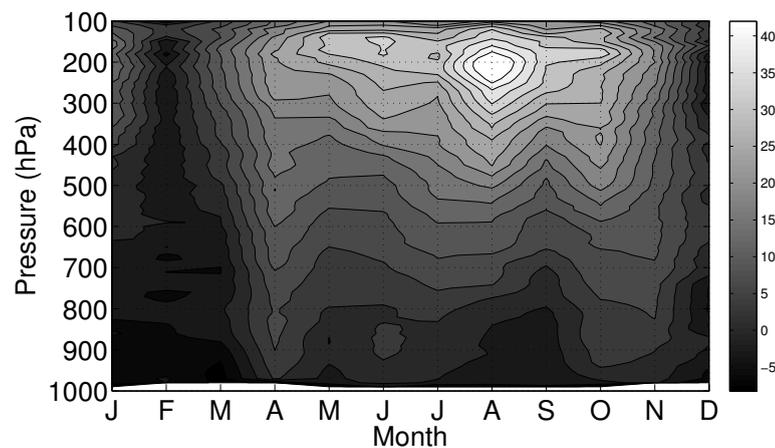
La variación de la razón de mezcla de ozono en la tropósfera baja puede atribuirse a procesos de convección somera y desarrollo de la capa límite marina, los cuales -producto del incremento (disminución) de la energía solar incidente en verano (invierno)- activarían (inhibirían) el transporte vertical de aire pobre en ozono desde las capas inferiores a las capas intermedias de la tropósfera.

En caso de existir transporte significativo de emisiones antrópicas precursoras de ozono hacia Rapa Nui, se deberán incluir en el análisis procesos de formación fotoquímica de ozono, los cuales se asocian a incrementos primaverales de la razón de mezcla típicamente localizados en la tropósfera media (Jensen et al., 2012 [14]).

La variación de la razón de mezcla de ozono en la tropósfera media-alta puede atribuirse a la activación o inhibición de procesos de intercambio entre la estratósfera y la tropósfera. Tal es el caso del transporte turbulento inducido por el STJ o de los quiebres de la tropopausa causados por el paso de fuertes perturbaciones sinópticas. Sin embargo, el desfase temporal entre el máximo de intensidad del STJ y el máximo de razón de mezcla de ozono complejiza la verificación de esta hipótesis, haciendo necesario el estudio de campos meteorológicos adicionales.



(a)



(b)

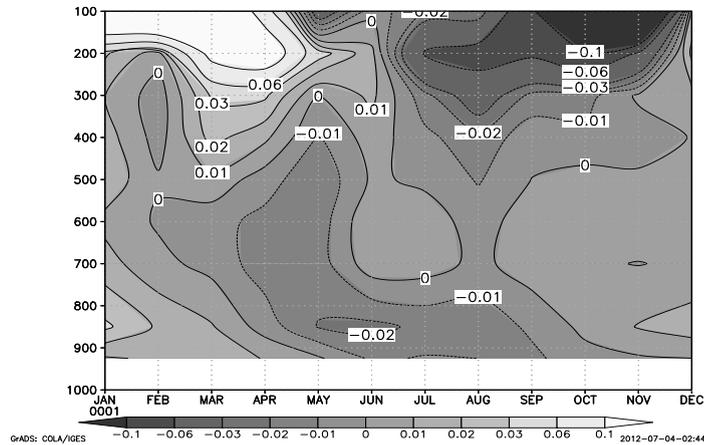
Figura 9.1: Ciclo anual de ozono y viento zonal sobre Rapa Nui. En (a) se muestra el ciclo anual de ozono -en $ppbv$ - obtenido a partir de los datos de los sondeos. La línea gruesa y continua corresponde al contorno de $100 ppbv$. En (b) se muestra el ciclo anual de viento zonal -en m/s - obtenido a partir de los datos de los sondeos. En ambos casos las coordenadas verticales son de presión entre $1000 hPa$ y $100 hPa$.

La figura 9.2 muestra en (a), (b) y (c) la anomalía del ciclo anual de vorticidad potencial PV en PVU , el ciclo anual de velocidad vertical ω en $10^{-2}Pa/s$ y la anomalía del ciclo anual de gradiente de temperatura potencial $d\theta/dP$ en $10^{-2}K/hPa$ sobre Rapa Nui, respectivamente. En todos los casos las coordenadas verticales son de presión entre $1000 hPa$ y $100 hPa$. Los campos han sido generados a partir de datos climatológicos disponibles en los reanálisis NCEP/NCAR.

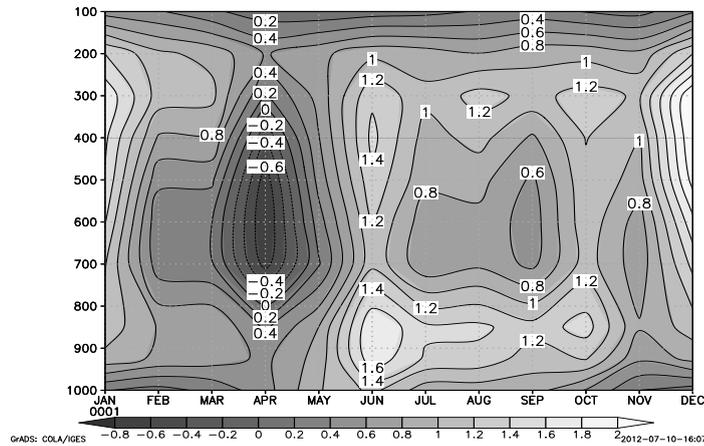
Si $PV(p, t)$ denota la vorticidad potencial sobre Rapa Nui en el nivel p y en el mes t , entonces la anomalía se calcula como $PV(p, t) - \overline{PV}(p)$, en donde $\overline{PV}(p)$ corresponde al promedio temporal de $PV(p, t)$.

En el Hemisferio Sur los valores de vorticidad potencial menores a $-1.5 PVU$ son característicos de aire estratosférico, por lo cual intrusiones troposféricas de vorticidad potencial con tales valores permiten identificar intercambio de aire entre la estratósfera y la tropósfera.

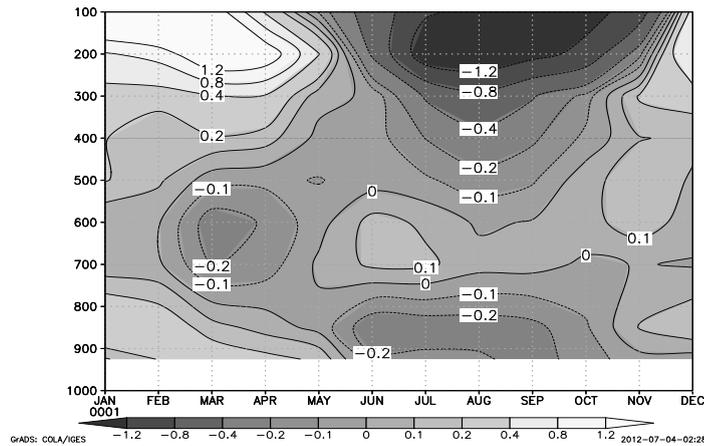
Si $\theta(p, t)$ denota la temperatura potencial sobre Rapa Nui en el nivel p y en el mes t , entonces el gradiente de temperatura potencial se calcula de manera discreta como $d\theta/dP(p_1, t) = \frac{\theta(p_2, t) - \theta(p_1, t)}{p_2 - p_1}$, en donde $p_2 > p_1$ denota el nivel inmediatamente inferior a p_1 . Con esta definición los valores positivos y negativos del gradiente de temperatura potencial están asociados a capas inestables y estables, respectivamente. La anomalía de gradiente de temperatura potencial se calcula de la misma manera que en el caso de vorticidad potencial.



(a)



(b)



(c)

Figura 9.2: Ciclo anual de vorticidad potencial, velocidad vertical ω y gradiente de temperatura potencial sobre Rapa Nui. En (a), (b) y (c) se muestran la anomalía del ciclo anual de vorticidad potencial PV en PVU , el ciclo anual de velocidad vertical ω en $10^{-2} Pa/s$ y la anomalía del ciclo anual de gradiente de temperatura potencial $d\theta/dP$ en $10^{-2} K/hPa$, respectivamente. En todos los casos las coordenadas verticales son de presión entre $1000 hPa$ y $100 hPa$. Los campos han sido generados a partir de datos

climatológicos disponibles en los reanálisis NCEP/NCAR.

A finales de verano y principios del otoño el PH muestra su menor influencia sobre la región de estudio. El STJ se encuentra en un punto intermedio de su recorrido latitudinal anual, entre su posición más lejana (50°S) y su posición más cercana (27°S) a la isla, influyendo de manera poco significativa sobre ésta. La ausencia de procesos que inhiban el transporte vertical hacia arriba y la energía solar incidente disponible durante este periodo, son coherentes con el máximo de ascenso anual que se observa en la figura 9.2 (b), el cual promueve el transporte de aire pobre en ozono desde capas inferiores a capas superiores de la tropósfera, justificando la existencia del mínimo de ozono sobre Rapa Nui.

A finales del otoño y a lo largo del invierno el STJ se aproxima latitudinalmente a Rapa Nui -con un máximo de intensidad de viento zonal en agosto producto del posicionamiento de su núcleo sobre la isla- permitiendo el transporte de aire rico en ozono desde la estratósfera hacia la tropósfera alta, mediante procesos de mezcla turbulenta. Sin embargo la zona de estabilidad vertical ubicada inmediatamente bajo el núcleo de STJ impide o reduce el transporte hacia las capas medias de la tropósfera, lo cual acumula ozono en la tropósfera alta. Las figuras y 9.2 muestran la coincidencia en el mes de agosto del máximo de intensidad del jet, de la máxima anomalía de vorticidad potencial y de la máxima anomalía de estabilidad vertical.

Es importante destacar que si bien la figura 9.2 (a) sugiere una intrusión de aire estratosférico en agosto, los correspondientes valores de vorticidad potencial no pertenecen al rango característico de la estratósfera. Esto se debe a que los eventos meteorológicos capaces de producir intrusiones estratosféricas con valores de vorticidad menores a -1.5 PVU -como quiebres de la tropopausa debidos a bajas segregadas intensas- son de escala sinóptica y por lo tanto su ocurrencia no es completamente capturada en un ciclo anual promedio.

En septiembre se mantienen, aunque más debilitadas, las condiciones descritas anteriormente. Sin embargo en octubre se observa una abrupta disminución de la intensidad del STJ sin variaciones latitudinales significativas de su núcleo. Ésto debilita la estabilidad vertical de manera concordante con un máximo relativo de descenso y el máximo anual de la razón de mezcla de ozono en la tropósfera media -figuras 9.2 (b) y (9.1)-. Además, durante este periodo el PH muestra su máxima influencia anual sobre la región de estudio.

En noviembre el STJ se aleja abruptamente de la isla (alcanzando los 50°S), llevando el sistema hacia el régimen de verano-otoño.

Por lo tanto, durante el verano y el otoño el sistema está principalmente modulado por el PH. En cambio durante el invierno y principalmente durante la primavera, las variaciones mensuales de razón de mezcla de ozono y de viento zonal -figura (6.3)- y el significativo desplazamiento latitudinal del STJ relativo al mostrado por el PH -figura (6.4)- sugieren que el sistema está principalmente modulado por el STJ. La existencia de estas variabilidades mensuales implica que un análisis estacional es insuficiente para estudiar el comportamiento del ozono en Rapa Nui.

9.2. SOM

9.2.1. Clasificaciones preliminares realizadas con ACP y K-MEANS

El análisis expuesto en la sección anterior considera mecanismos de transporte de ozono presentes en la tropósfera media-baja y/o en la tropósfera alta (incluyendo la zona de intercambio estratósfera-tropósfera).

Para el estudio la estructura del ozono en todo el rango vertical de la tropósfera se aplicó el algoritmo SOM a 186 perfiles de ozono interpolados linealmente cada 100 *m* en el rango 0.5-15 *km*. El límite inferior se fijó en 0.5 *km* debido a la gran cantidad de datos faltantes en el rango 0-0.5 *km*. El límite superior se fijó en 15 *km* con el objeto de incluir los mecanismos de intercambio estratósfera-tropósfera descritos en la sección anterior. En lo que sigue nos referiremos a este procedimiento como *Clasificación 1*.

Posteriormente, para el estudio del alcance de estos mecanismos de intercambio en la tropósfera media-baja y de su nivel de acoplamiento con otros mecanismos característicos de dicho nivel -como el desarrollo de la capa límite y la eventual formación fotoquímica de ozono- se aplicó el algoritmo SOM a 186 perfiles de ozono interpolados linealmente cada 100 *m* en el rango 0.5-7.5 *km*. En lo que sigue nos referiremos a este procedimiento como *Clasificación 2*.

De acuerdo a lo expuesto en el Anexo B.1, la clasificación en base a las componentes principales puede ser utilizada como condición inicial del método k-means, y el método SOM corresponde a una generalización estocástica del método k-means.

Luego el número de grupos a formar por el método SOM se determinó mediante la aplicación del método k-means, sugiriendo -independiente de la elección de la condición inicial- 4 y 3 grupos para las Clasificaciones 1 y 2, respectivamente.

9.2.2. Clasificaciones utilizando el Algoritmo SOM

Las siguientes definiciones están hechas de acuerdo a la notación introducida en el anexo B.2. Se utilizarán los subíndices 1 y 2 para referirse a los parámetros propios de los procesos de Clasificación 1 y 2, respectivamente. En caso de que el valor de los parámetros sea el mismo para ambos procesos no se utilizará subíndice en su definición. En ambos casos el algoritmo fue implementado de modo que fuera posible utilizar perfiles con datos faltantes.

Sean Ω_1 y Ω_2 los conjuntos de datos de entrada, conformados por $m = 186$ perfiles de ozono de tamaño $n_1 = 146$ y $n_2 = 71$, los cuales -de acuerdo a la información entregada por los análisis anteriores- serán particionados en $k_1 = 4$ y $k_2 = 3$ grupos, respectivamente.

Sean $T_g = 1000$ y $T_f = 850$ horizontes temporales asociados a las etapas de aprendizaje grueso y fino. Los intervalos $[0, T_g]$ y $[0, T_f]$ ha sido discretizados con un paso temporal unitario.

Sean R_1 y R_2 grillas en \mathbb{R}^2 compuestas por k_1 y k_2 nodos dispuestos a lo largo del eje de las ordenadas. Dotaremos a estas grillas de una topología rectangular y de una forma global cilíndrica.

Sean $\sigma_1^g, \sigma_2^g : [0, T_g] \rightarrow \mathbb{R}$ y $\sigma^f : [0, T_f] \rightarrow \mathbb{R}$ las funciones de radio de vecindad para las etapas de aprendizaje grueso y fino, respectivamente. Sean los valores iniciales $\sigma_1^g(0) = \frac{k_1}{2}$, $\sigma_2^g(0) = \frac{k_2}{2}$ y $\sigma^f(0) = 2$, y los valores finales $\sigma_1^g(T_g) = 1$, $\sigma_2^g(T_g) = 1$ y $\sigma^f(T_f) = 1$. La forma explícita de las funciones de radio de vecindad corresponderá a una relación lineal entre los valores extremos recién definidos.

Las funciones de vecindad son del tipo *ep* y las tasas de aprendizaje son del tipo *inv* (con $\alpha_0 = 0,5$ y $\beta_3 = 100$).

Si bien el algoritmo se inicializó de manera aleatoria, clasificaciones anteriores inicializadas a partir de las componentes principales arrojaron resultados similares.

Recordemos que, mientras la inicialización aleatoria permite utilizar perfiles con datos faltantes -siendo especialmente útil cuando se tienen pocos perfiles y/o cuando se desea aplicar el algoritmo a perfiles en distintos rangos de altura-, la inicialización a partir de las componentes principales requiere que los perfiles no presenten datos faltantes. En las Clasificaciones 1 y 2 -inicializadas de esta forma- el número de perfiles utilizables se reduce de 186 a 181 y 182, respectivamente.

La etapa de aprendizaje se compuso de 2 subetapas ejecutadas consecutivamente: la primera de aprendizaje grueso y la segunda de aprendizaje fino, ambas caracterizadas por parámetros -como tasas de aprendizaje y tamaños de vecindades- que permitieran modificar de manera global y local los valores de los vectores de peso, respectivamente.

9.2.3. Clasificación 1

Los resultados de la Clasificación 1 -figura 9.3- muestran que:

1. En todos los grupos el representante coincide con el perfil medio del grupo.
2. El grupo $G2$ -conformado por 50 perfiles- muestra un histograma de meses centrado en el invierno. El representante presenta valores mayores al perfil medio total en todo el rango de altura.
3. El grupo $G1$ -conformado por 15 perfiles- muestra un histograma de meses centrado en el invierno, con una distribución menos precisa en comparación al grupo $G2$, posiblemente debido al bajo número de perfiles. El representante presenta valores mayores al representante del grupo $G1$ en todo el rango de altura. En particular, en la tropósfera alta los valores del representante del grupo $G2$ son mayores a la desviación del grupo $G1$.

4. El grupo $G3$ -conformado por 82 perfiles- muestra un histograma de meses centrado en el otoño y principios del invierno. El representante presenta valores menores al perfil medio total en todo el rango de altura.
5. El grupo $G4$ -conformado por 39 perfiles- muestra un histograma de meses con perfiles distribuidos uniformemente en verano, otoño e invierno y ausentes en primavera. En la tropósfera baja el representante presenta valores menores al perfil medio total. En la tropósfera media el representante presenta valores del orden del perfil medio total. En la tropósfera alta -bajo la región de intercambio- el representante presenta valores menores al perfil medio total y -sobre la región de intercambio- el representante presenta valores mayores al perfil medio total.

El grupo $G2$ se asociará a las condiciones climatológicas propias del invierno y comienzo de la primavera -figura 9.1- en donde la estructura del ozono en la tropósfera alta queda determinada por el transporte turbulento inducido por el jet. Nos referiremos a este grupo como *grupo de transporte turbulento*.

El grupo $G1$ se asociará a intrusiones de ozono provocadas por sistemas ciclónicos cuya región de descenso tiene una ubicación e intensidad propicias para el transporte de ozono desde la estratósfera hacia la tropósfera. Nos referiremos a este grupo como *grupo intrusivo*.

Notemos que la superposición de estas perturbaciones a las condiciones climatológicas asociadas al STJ modifica los mecanismos que determinan la estructura del movimiento horizontal y vertical. En general, la estructura vertical de un sistema ciclónico muestra descenso y ascenso a la izquierda y a la derecha del eje de la vaguada, respectivamente. Típicamente el movimiento del núcleo de las perturbaciones baroclínicas es hacia el este, con velocidades medias de sus núcleos descritas en Keable et al, 2002 [17] de 8 m/s durante el invierno en el Pacífico Sur. No obstante, es posible que una baja segregada adopte velocidades distintas a las de la perturbación de la cual se desprendió, pudiendo incluso instalarse con velocidad nula en un punto específico. Por lo tanto, el movimiento vertical sobre la isla, inducido por una perturbación baroclínica, dependerá de la ubicación y movimiento del núcleo de la perturbación. Por otro lado, la velocidad horizontal del viento en el eje de la vaguada se debilita a medida que la vaguada se agudiza, siendo de especial importancia el caso en donde una perturbación de éstas se superpone al STJ. En tal caso, el movimiento de mezcla turbulenta inducido por el STJ -debido a cizalles verticales de viento- es de menor importancia en comparación al movimiento vertical inducido por la perturbación.

El grupo $G3$ se asociará a las condiciones climatológicas propias del otoño y comienzo del invierno -figura 9.1- en donde la estructura del ozono en la tropósfera alta queda determinada por la ausencia de transporte turbulento inducido por el jet. Además el valor mínimo anual de la subsidencia de gran escala y la energía solar disponible a principios de otoño activa procesos de convección somera que transportan aire pobre en ozono desde la tropósfera baja a la tropósfera media. Nos referiremos a este grupo como *grupo convectivo*.

El grupo $G4$, con perfiles presentes de manera relativamente uniforme durante todo el

año salvo en primavera, no se asociará a procesos climatológicos de escala aproximadamente estacional como en el caso de los grupos $G2$ y $G3$. A falta de un mecanismo que permita comprender su estructura, nos referiremos a este grupo como *grupo de casos extraños*.

Cuando la clasificación se realiza para un número predeterminados de 3 grupos se conforman grupos similares al de *transporte turbulento* con 74 perfiles, al *convectivo* con 93 perfiles y al *intrusivo* con 19 perfiles. Sin embargo la menor precisión de los histogramas de meses -respecto de la clasificación con 4 grupos- sugiere que los mecanismos propuestos son relevantes aunque insuficientes para describir la totalidad de la estructura de ozono. Por lo tanto, una clasificación con 4 grupos entrega al algoritmo la holgura necesaria para identificar el conjunto de los perfiles que no se ajustan a ninguno de los 3 mecanismos propuestos.

Cuando la clasificación se realiza para un número predeterminado de 5 grupos se conforman grupos similares al de *transporte turbulento* con 28 perfiles, al *convectivo* con 62 perfiles, al *intrusivo* con 8 perfiles y al *casos extraños* con 21 perfiles. El quinto grupo, conformado por 67 perfiles, tiene un representante que aproximadamente igual a la media total de ozono y un histograma de meses distribuido uniformemente a lo largo de todo el año con una ligera razón de mezcla en invierno.

La constitución del quinto grupo no debe asociarse a un rasgo climatológico medio de los datos, ya que -desde un punto de vista físico- no tiene sentido que un patrón de este tipo -con el cual se identifica aproximadamente el 30 % de los datos- no sea observable para clasificaciones de 3 o 4 grupos. Más bien notemos que los 4 primeros grupos reducen su número de perfiles entre un 25 % y un 50 % respecto de la clasificación de 4 grupos, especificando y/o extremando los rasgos que los definen, de manera tal que el quinto grupo se constituiría a partir de los perfiles que no se ajustan correctamente a este criterio más exigente.

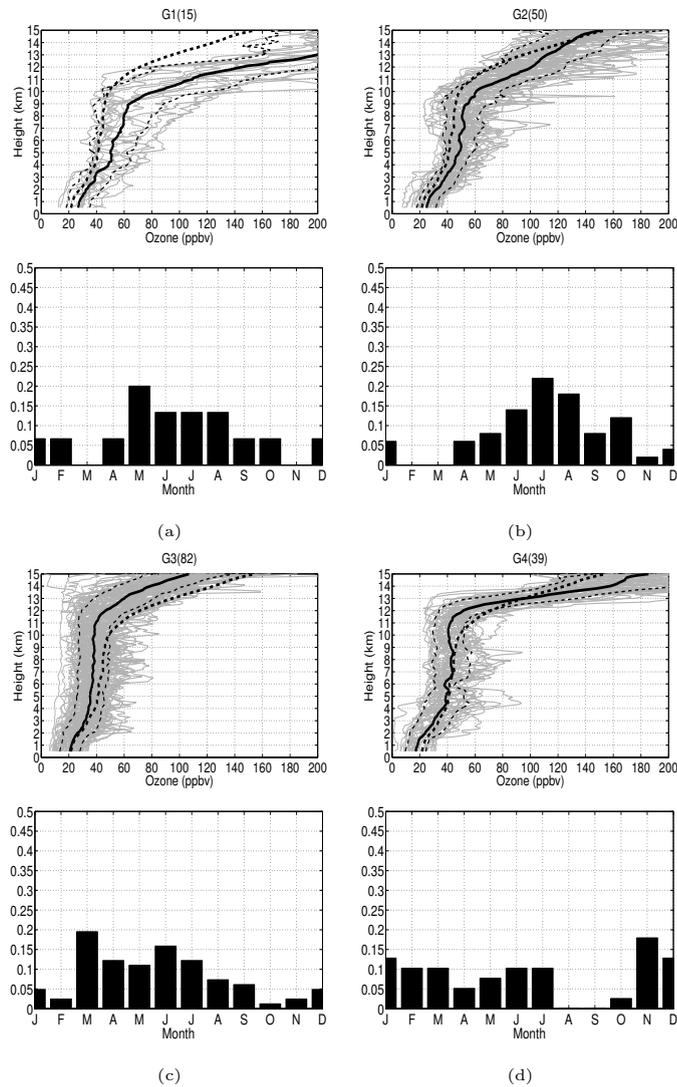


Figura 9.3: Clasificación de los perfiles de ozono en el rango 0.5-15 *km* e histogramas normalizados de los meses de cada perfil. (a), (b), (c) y (d) corresponden a los grupos G1, G2, G3 y G4, respectivamente. La línea negra, gruesa y segmentada corresponde al perfil medio total de ozono (obtenido a partir de todos los perfiles) Las líneas grises y continuas corresponden a los perfiles de ozono de cada grupo. La línea negra, gruesa y continua corresponde al nodo de cada grupo. La línea negra y segmentada corresponde a una desviación con respecto al nodo de cada grupo.

9.2.4. Visualización de la Clasificación 1 en un conjunto de baja dimensión

Se han utilizado las 2 primeras componentes principales asociadas a los datos para construir una visualización bidimensional de éstos.

La figura 9.4 muestra las 2 primeras componentes principales PC_1 y PC_2 obtenidas a partir de un total de 181 perfiles completos en el rango 0.5-15 *km*, explicando un 69% y un 13% de la varianza de los datos, respectivamente. La figura 9.5 muestra la proyección de los perfiles sobre PC_1 y PC_2 . El tipo de marcador y el color del marcador indican el

grupo y la estación del año a la cual pertenecen los datos, respectivamente.

Notemos que PC_1 es uniformemente mayor al perfil medio total de ozono. Por lo tanto el valor de la proyección de un perfil en la dirección de PC_1 da una medida de la significancia de este rasgo en la estructura total del perfil.

Ahora bien, notemos que los datos proyectados se dispersan principalmente en la dirección de PC_1 . A grandes rasgos el grupo $G3$ -indicado con marcador tipo cruz- verifica $PC_1 < 0$ y simetría con respecto a PC_2 , el grupo $G2$ -indicado con marcador cuadrado- verifica $PC_2 < 0$ y $PC_1 \sim 0$, el grupo $G4$ -indicado con marcador tipo punto- verifica $PC_2 > 0$ y $PC_1 \sim 0$, y el grupo $G1$ -indicado con marcador circular- verifica $PC_1 > 0$ y simetría con respecto a PC_2 , mostrando -respecto de los otros grupos- la mayor dispersión.

Del mismo modo y de acuerdo a la figura 9.3 el representante del grupo $G3$ verifica $PC_1 < 0$ y $PC_2 \sim 0$, lo cual es concordante con su rasgo subclimatológico. El representante del grupo $G2$ verifica $PC_1 > 0$ y $PC_2 < 0$, lo cual es concordante con su rasgo sobreclimatológico en el rango 0.5-12 km y con su rasgo climatológico en el rango 12-15 km . El representante del grupo $G4$ verifica $PC_1 > 0$ y $PC_2 > 0$, lo cual es concordante con su rasgo climatológico en el rango 0.5-8 km y con la estructura presente en el rango 8-15 km . El representante del grupo $G1$ verifica $PC_1 > 0$ y $PC_2 \sim 0$, lo cual es concordante con su rasgo sobreclimatológico.

Lo anterior permite dotar de un significado físico a PC_1 , asociándola a los procesos que aumentan o disminuyen la razón de mezcla de ozono uniformemente con respecto a la media total. Tal es el caso de los procesos convectivos e intrusivos asociados a los grupos $G3$ y $G1$, respectivamente. Del mismo modo PC_2 se asociará a los procesos que aumentan o disminuyen la razón de mezcla de ozono no uniformemente con respecto a la media total, con énfasis en el rango 12-15 km . Tal es el caso del transporte turbulento de ozono inducido por el STJ asociado al grupo $G2$, el cual se encuentra restringido a la tropósfera alta debido a la estabilidad vertical propia del STJ.

Finalmente, una vez que se ha sido posible asignar una interpretación a las componentes principales, se puede utilizar el mapa de proyecciones para identificar casos extremos de los mecanismos físicos involucrados. Esto es especialmente útil en el caso en que una gran cantidad de datos hace inviable una inspección uno-a-uno de éstos.

En particular esta técnica ha sido utilizada para identificar un caso extremo de intrusión en la fecha 4/10/2012 -figura 9.5- mediante la selección del perfil con mayor proyección sobre PC_1 .

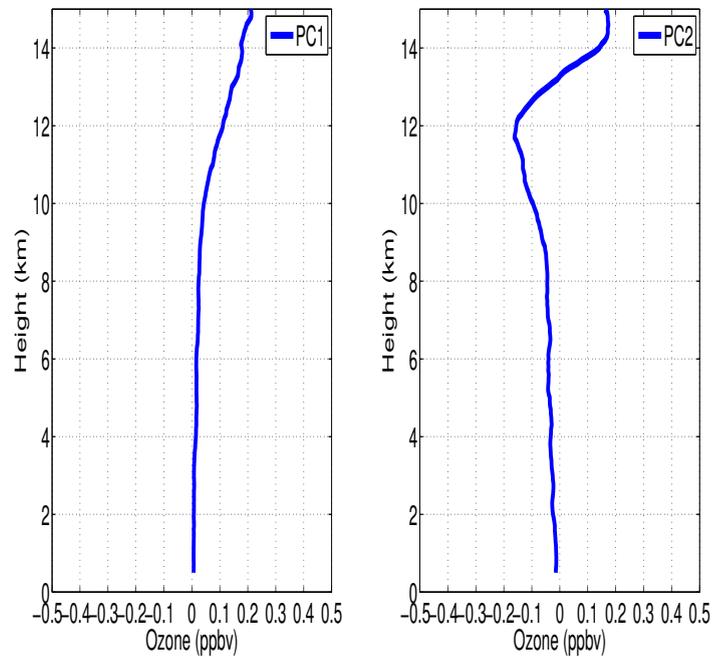


Figura 9.4: Primera y segunda componente principal para el rango 0.5-15 *km* respecto del perfil medio total de ozono.

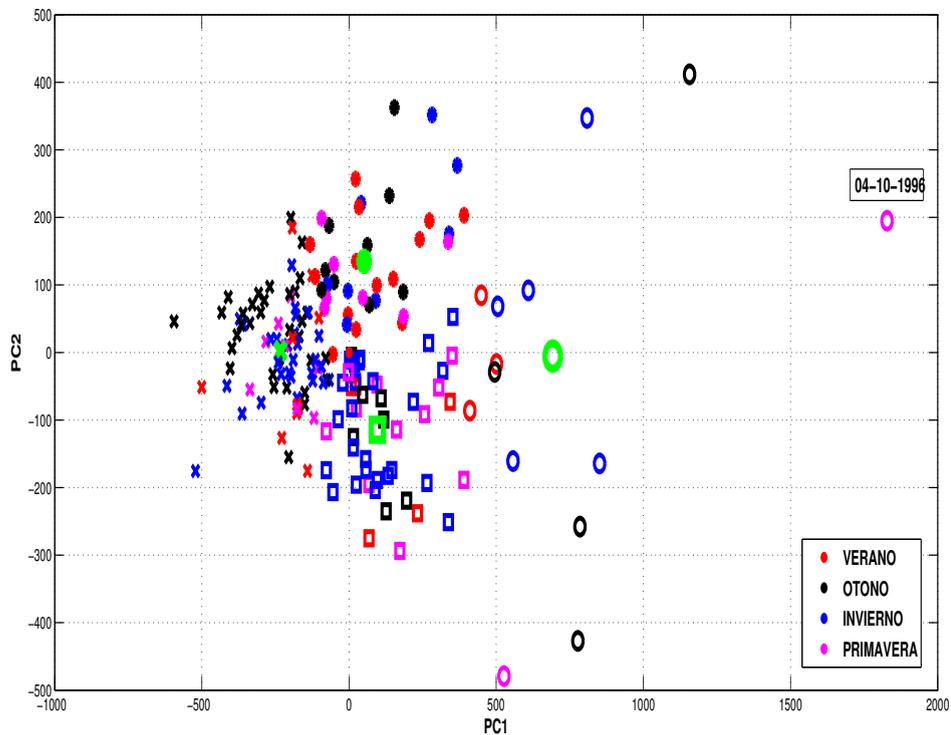


Figura 9.5: Mapa de proyección para el rango 0.5-15 *km*. Los grupos G_1 , G_2 , G_3 y G_4 están indicados con marcadores circular, cuadrado, tipo cruz y tipo punto, respectivamente. Las

estaciones verano, otoño, invierno y primavera están indicadas con los colores rojo, negro, azul y magenta, respectivamente. Los marcadores grandes y de color verde corresponden a la proyección del nodo de cada grupo. Se ha indicado la fecha del perfil con mayor proyección sobre PC_1 .

9.2.5. Clasificación 2

Los resultados de la Clasificación 2 -figura 9.6- muestran que:

1. En todos los grupos el representante coincide con el perfil medio del grupo.
2. El grupo $G2$ -conformado por 78 perfiles- muestra un histograma de meses centrado en el invierno. El representante presenta valores mayores y similares al perfil medio total en los rangos 0.5-4 km y 4-7.5 km , respectivamente.
3. El grupo $G1$ -conformado por 39 perfiles- muestra un histograma de meses centrado en la primavera. El representante presenta valores mayores al representante del grupo $G1$ en todo el rango de altura. En particular, en el rango 4-7.5 km los valores del representante del grupo $G2$ son mayores a la desviación del grupo $G1$.
4. El grupo $G3$ -conformado por 67 perfiles- muestra un histograma de meses centrado en el otoño. El representante presenta valores menores al perfil medio total en todo el rango de altura.

El grupo $G2$ se asociará a las condiciones climatológicas propias del invierno -figura 9.1-. Los valores del representante -del orden de la media total de ozono en el rango 4-7.5 km - indican que durante el invierno los efectos del transporte turbulento de ozono inducido por el STJ se limitan a la tropósfera alta. Los valores del representante por sobre la media total de ozono en el rango 0.5-4 km se atribuyen a una capa límite marina poco desarrollada producto de la escasa energía solar incidente durante invierno. Nos referiremos a este grupo como *grupo invernal*.

Notemos que los grupos $G1$ de las clasificaciones 1 y 2 se conforman de 15 y 39 perfiles, con histogramas de meses centrados hacia el invierno y la primavera, respectivamente. El incremento de la razón de mezcla de ozono en el rango 0.5-7.5 km se debe al transporte de escala sinóptica asociado al paso de sistemas ciclónicos y al transporte de escala climatológica asociado al STJ. El grupo $G1$ de la Clasificación 2 se constituye detectando el incremento de la razón de mezcla de ozono, contando no sólo con perfiles asociados al primer mecanismo -según se muestra en la figura 9.6 (a) en el rango 0.5-15 km - sino que también con perfiles asociados al segundo mecanismo, diferenciándose del grupo $G1$ de la Clasificación 1. La diferencia de los histogramas de meses de cada uno de estos grupos se debe a que la máxima frecuencia de sistemas ciclónicos en el Hemisferio Sur se da en invierno -Keable et al., 2002 [17]- y que el máximo de razón de mezcla de ozono debido a mecanismos climatológicos se da a principios y mediados de la primavera -figura 9.1-. Hechas estas consideraciones, nos referiremos a este grupo como *grupo intrusivo*.

El grupo $G3$ se asociará a las condiciones climatológicas propias del otoño -figura 9.1- en donde el valor mínimo anual de la subsidencia de gran escala y la energía solar disponible a principios de otoño activa procesos de convección somera que transportan aire

pobre en ozono desde la tropósfera baja a la tropósfera media. Nos referiremos a este grupo como *grupo convectivo*.

Cuando la clasificación se realiza para un número predeterminado de 4 grupos se conforman grupos similares al *invernal* con 62 perfiles, al *convectivo* con 47 perfiles y al *intrusivo* con 37 perfiles. El cuarto grupo, conformado por 38 perfiles, tiene un representante aproximadamente igual a la media total de ozono en el rango 4-7.5 *km* y bajo la media total de ozono en el rango 0.5-4 *km*. La ausencia de estructura del histograma de meses y la marcada estacionalidad de los procesos considerados en la Clasificación 2 sugieren que este cuarto grupo no posee un mecanismo físico que lo sustente.

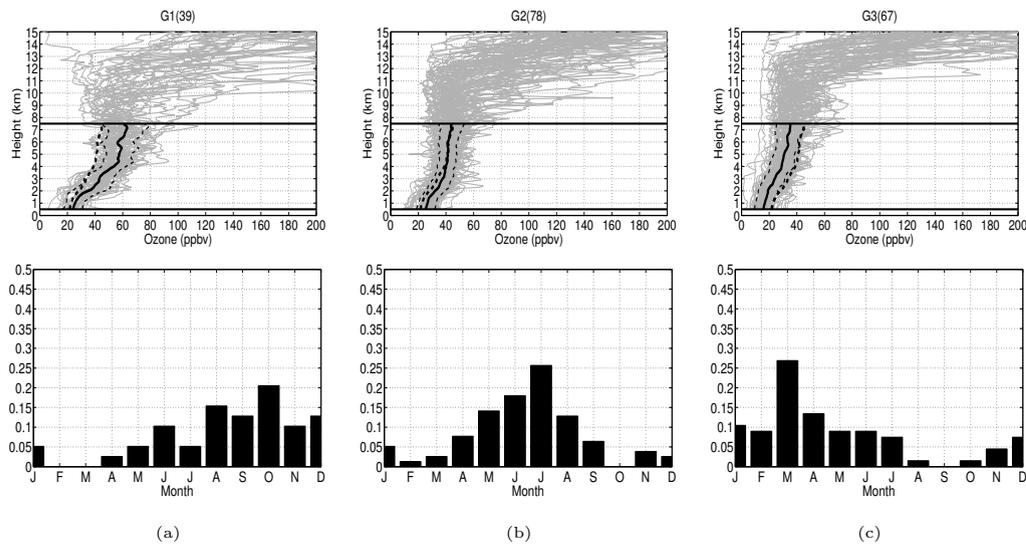


Figura 9.6: Clasificación de los perfiles de ozono en el rango 0.5-7.5 *km* e histogramas normalizados de los meses de cada perfil. (a), (b) y (c) corresponden a los grupos G1, G2 and G3, respectivamente. La línea negra, gruesa y segmentada corresponde al perfil medio total de ozono (obtenido a partir de todos los perfiles). Las líneas grises y continuas corresponden a los perfiles de ozono de cada grupo. La línea negra, gruesa y continua corresponde al nodo de cada grupo. La línea negra y segmentada corresponde a una desviación con respecto al nodo de cada grupo.

Es importante destacar que clasificaciones realizadas para el rango 7.5-15 *km* arrojan resultados muy similares a la Clasificación 1, indicando que para efectos del algoritmo SOM los rasgos de los perfiles en el rango 0.5-7.5 *km* son secundarios respecto de los rasgos en el rango 7.5-15 *km*. Esto no quiere decir que los mecanismos de la tropósfera media baja no sean relevantes en el estudio de la estructura del ozono, sino que el rasgo más distintivo de los perfiles está determinado por los mecanismos de la tropósfera alta.

9.3. Análisis de Casos

Se ha realizado un análisis de las condiciones presentes en los sondeos de los días 28 de agosto del 2009, 4 de octubre del 1996.

A continuación se indica la simbología utilizada en las imagenes asociadas a los análisis sinópticos que se describirán a continuación, considerando las condiciones 2 días antes y 1 día después de la fecha en cuestión (figuras 9.8 y 9.10).

1. La primera columna muestra, en 200 *hPa*: magnitud del viento zonal (sombreado), viento mayor a 25 *m/s* (vectores), altura geopotencial (contornos delgados) y velocidad omega (contorno gruesos).
2. La segunda columna muestra, en la superficie isentrópica de 320 *K* : vorticidad potencial (sombreado) destacando el valor estratosférico con un contorno grueso, viento isentrópico mayor a 25 *m/s* (vectores) y altura geopotencial (contornos delgados).
3. La tercera columna muestra un corte longitudinal sobre la isla, entre 1000 y 200 *hPa*: vorticidad potencial (sombreado) destacando el valor estratosférico con un contorno grueso, humedad específica (contornos delgados) y velocidad omega (contornos normales). La línea vertical indica la posición de la isla.

Con respecto del perfil del día 28 de agosto del 2009 y de las condiciones meteorológicas asociadas se tiene que:

1. Pertenece al grupo de transporte turbulento -figura 9.7-.
2. Su mes de lanzamiento -agosto- corresponde al de máxima intensidad del STJ sobre Rapa Nui a escala climatológica -figuras 9.1 (b) y 6.3-.
3. El análisis sinóptico expuesto en la figura 9.8
 - a) Influencia del STJ y de un sistema ciclónico sobre la región de estudio los días -2, -1, 0 y 1. A lo largo de estos días el paso del sistema ciclónico por sobre la isla disminuye la intensidad del STJ, pero no lo interrumpe. Esto implica que el paso del sistema ciclónico no desactiva los mecanismos de transporte turbulento inducidos por el STJ.
 - b) Debido al paso del sistema ciclónico la estructura del movimiento vertical sobre Rapa Nui corresponde a ascenso el día -2 y descenso los días -1, 0 y 1.
 - c) El día -2 la superficie de VP -característica de la tropopausa- se posiciona sobre Rapa Nui. Esto, sumado a la dirección del viento isentrópico sobre la isla, sugieren la existencia de transporte de aire estratosférico hacia la tropósfera alta. Esta situación también se observa, aunque menos definidamente, los días -1 y 0.
 - d) Las secciones longitudinales muestran que en los días -2 y -1 la superficie de VP característica de la tropopausa penetra la tropósfera hasta los 350 *hPa*. Los valores de VP entre -1 y -1.5 *UVP* revelan una marcada intrusión hasta los 700 *hPa*, con una correspondiente disminución de la humedad específica a valores del orden de 0.001 *g/Kg* en el rango 200-700 *hPa*.

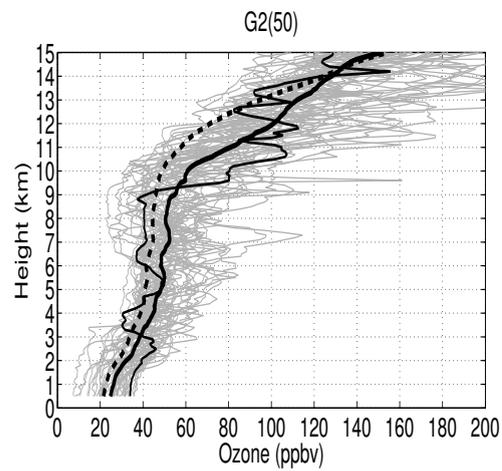


Figura 9.7: Caso del 28-08-2009. La línea negra, gruesa y segmentada corresponde al perfil medio total de ozono (obtenido a partir de todos los perfiles) Las líneas grises y continuas corresponden a los perfiles de ozono de cada grupo. La línea negra, gruesa y continua corresponde al nodo de cada grupo. La línea negra y continua corresponde al caso particular correspondiente.

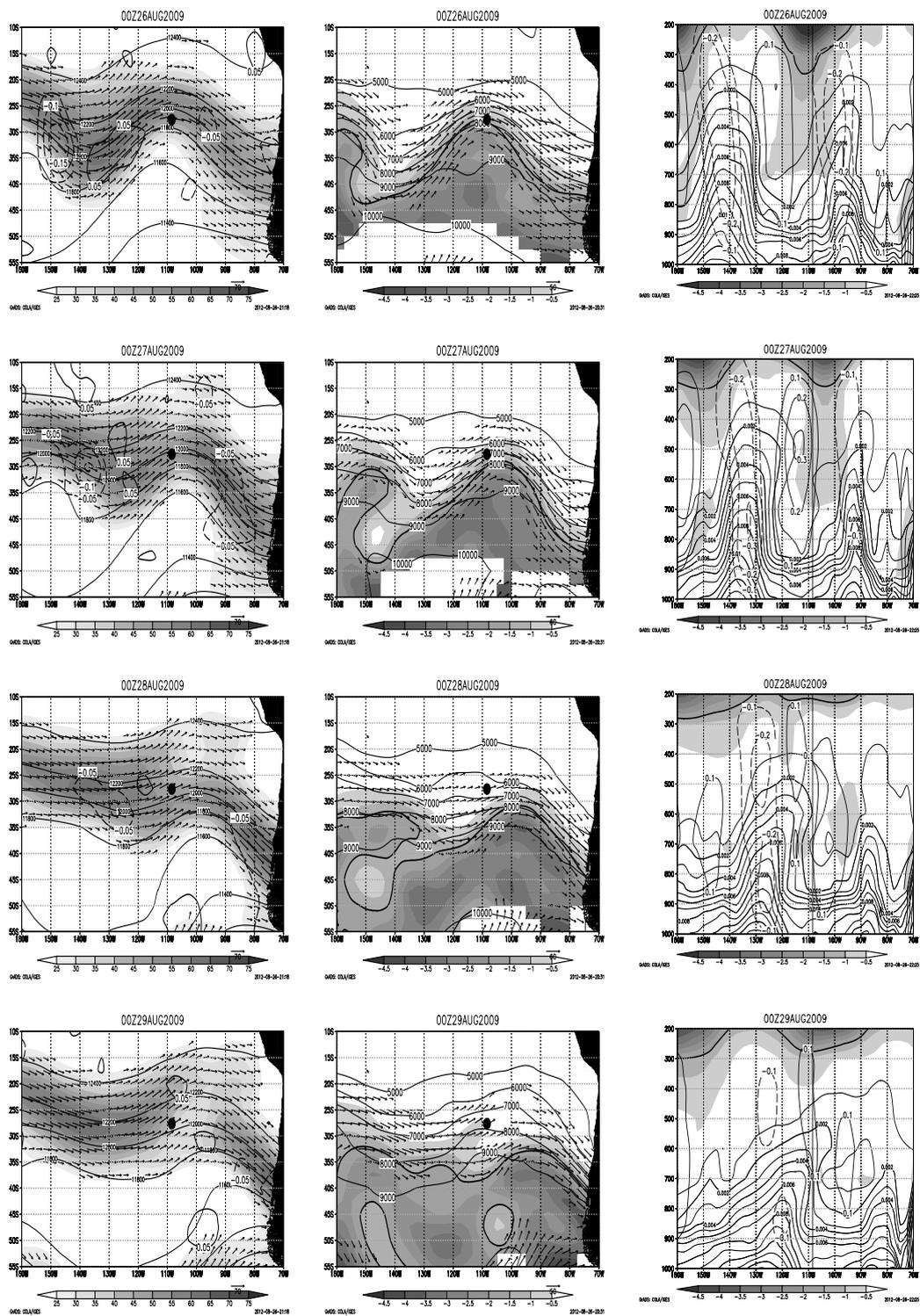


Figura 9.8: Análisis sinóptico caso 28-08-2009.

Con respecto del perfil del día 4 de octubre del 1996 y de las condiciones meteorológicas asociadas se tiene que:

1. Pertenece al grupo intrusivo -figura 9.9-.
2. En su mes de lanzamiento -octubre- la intensidad del STJ sobre Rapa Nui a escala climatológica disminuye significativamente respecto de agosto y septiembre -figuras 9.1 (b) y 6.3-.
3. El análisis sinóptico expuesto en la figura 9.10
 - a) Desplazamiento de la zona de máxima intensidad del STJ hacia el norte de Rapa Nui debido al paso de un sistema ciclónico sobre la región de estudio los días -3 (no mostrado), -2, -1, 0 y 1. A lo largo de estos días el paso del sistema ciclónico por sobre la isla disminuye significativamente la intensidad del STJ a valores menores a 25 m/s . Esto implica que el paso del sistema ciclónico desactiva los mecanismos de transporte turbulento inducidos por el STJ.
 - b) Debido al paso del sistema ciclónico la estructura del movimiento vertical sobre Rapa Nui corresponde a ascenso los días -2 y -1 y descenso el día 0.
 - c) Los días -3 (no mostrado), -2 y -1 la superficie de VP -característica de la tropopausa- se aproxima a Rapa Nui, proyectándose con valores no estratoféricos mayores a -1.5 PVU sobre una región ubicada a la izquierda de Rapa Nui.
 - d) Las secciones longitudinales muestran que en los días -3 (no mostrado), -2 y -1 la superficie de VP característica de la tropopausa penetra la tropósfera hasta los 320 hPa al oeste de Rapa Nui. Los valores de VP entre -1 y -1.5 UVP revelan una marcada intrusión hasta los 700 hPa , con una correspondiente disminución de la humedad específica a valores del orden de 0.001 g/Kg en el rango $200\text{-}700 \text{ hPa}$. Luego, el viento isentrópico sobre la isla -de dirección este- transportaría aire rico en ozono desde la región de la intrusión hacia la isla.

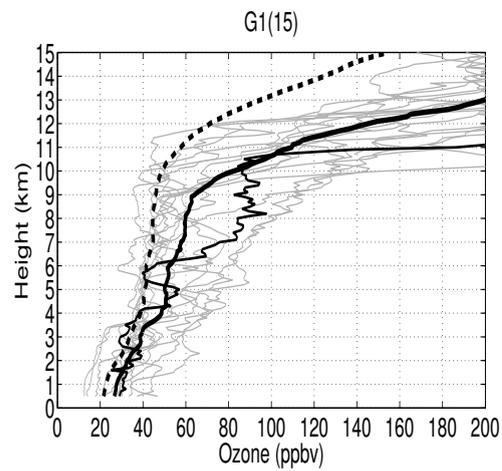


Figura 9.9: Caso del 4-10-1996. La línea negra, gruesa y segmentada corresponde al perfil medio total de ozono (obtenido a partir de todos los perfiles) Las líneas grises y continuas corresponden a los perfiles de ozono de cada grupo. La línea negra, gruesa y continua corresponde al nodo de cada grupo. La línea negra y continua corresponde al caso particular correspondiente.

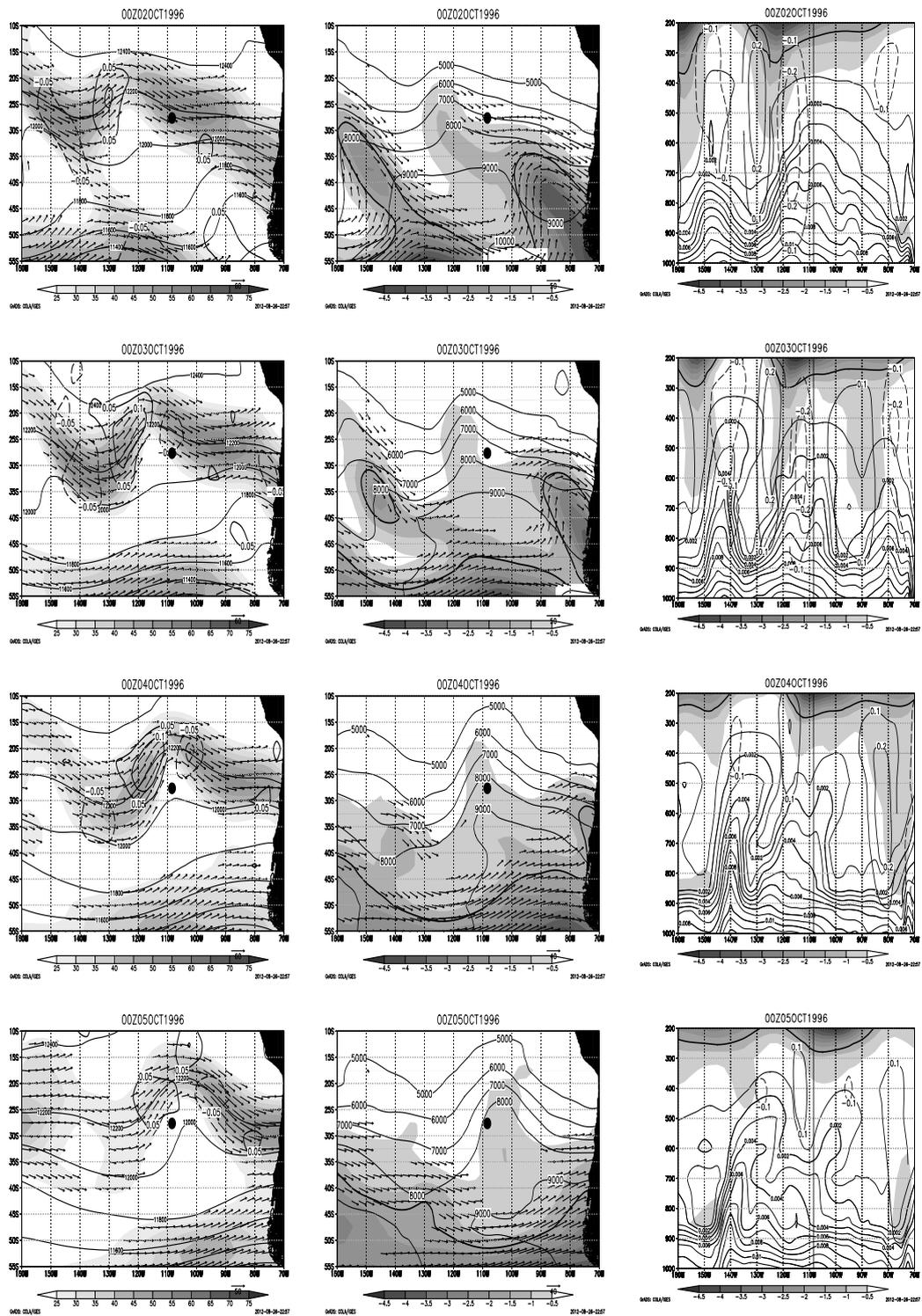


Figura 9.10: Análisis sinóptico caso 4-oct-1996.

9.4. Análisis de Tendencia

Se ha realizado un análisis de las series de tiempo de razón de mezcla de ozono entre finales del año 1994 y finales del año 2010, considerando 8 niveles de presión entre 900 *hPa* y 200 *hPa* con un paso de 100 *hPa*. El número de datos disponibles en estos niveles varía entre 181 y 184.

En relación a lo expuesto en el Capítulo 7, la serie presenta una mayor frecuencia de sondeos en los años 1996 y 1997, teniendo en cuenta de que en el año 1995 aproximadamente el 50 % de éstos resultaron ser defectuosos. Los años 1998, 2000, 2001, 2002 y 2003 presentan una abrupta disminución del número de sondeos. Desde el año 2004 hasta el año 2010 el número de sondeos aumenta -aunque a valores menores a los de los años 1996 y 1997- distribuyéndose con relativa uniformidad en todo el periodo.

Se observa que la dispersión de los datos aumenta a medida que disminuye la presión.

En los niveles 900 *hPa* y 800 *hPa* el mayor muestreo de los años 1996 y 1997 permite identificar un ciclo anual. Sin embargo esta característica no es reconocible en el periodo 2004-2010, lo cual sugiere que el muestreo de este periodo es insuficiente por lo menos para determinar periodicidades en los datos. Por otro lado, el rango anual de los datos -de 1994 al 2010- no permite detectar variabilidades ENOS.

Se realizó una regresión lineal de los datos para cada nivel de presión, concluyendo que los datos disponibles no muestran tendencias estadísticamente significativas, salvo para los niveles de 300 *hPa* y 400 *hPa* en donde se observa tendencias del orden de -0.6 *ppbv* por año.

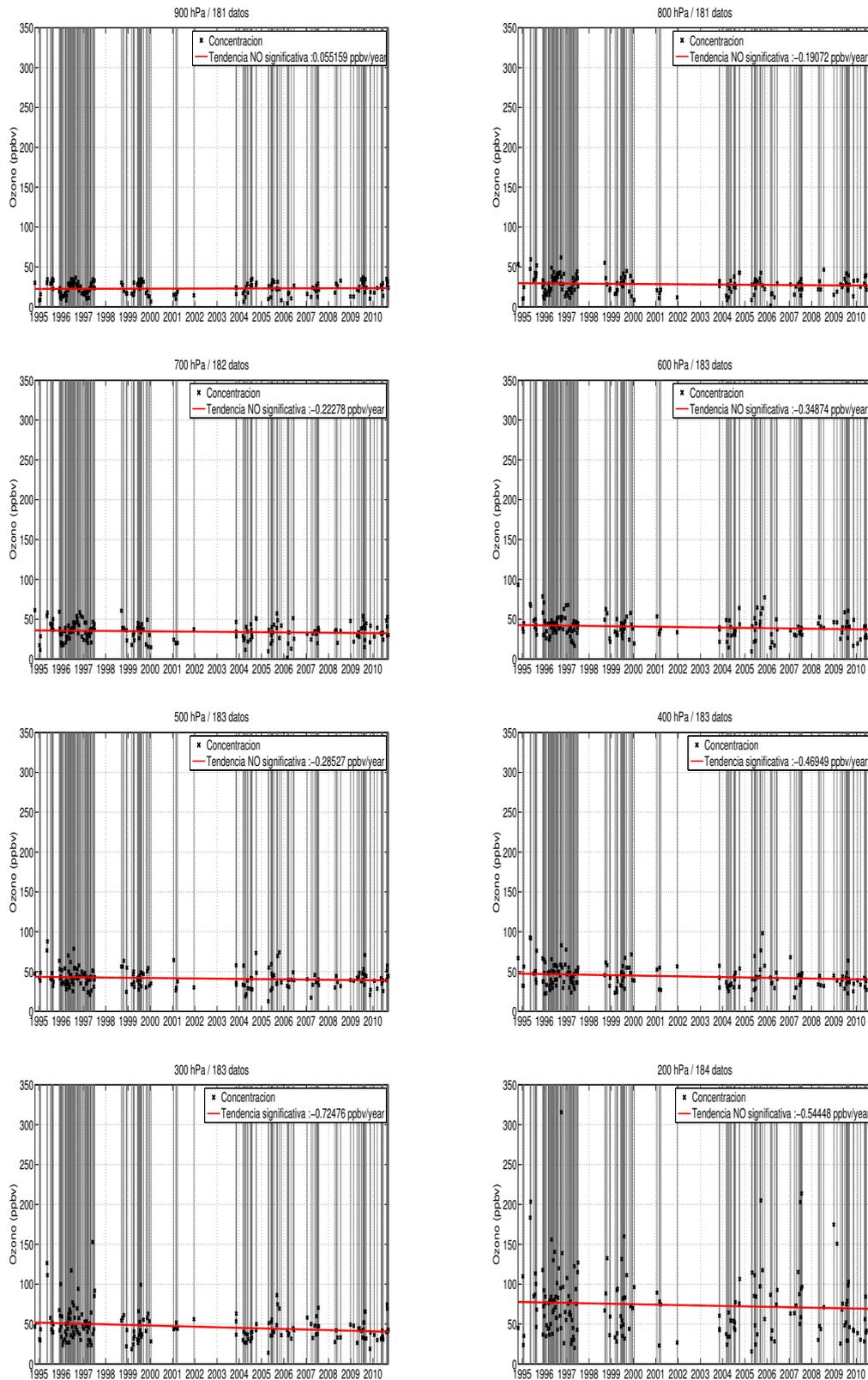


Figura 9.11: Análisis de tendencia para la razón de mezcla de ozono. Los marcadores indican la razón de mezcla de ozono, la línea continua roja corresponde a la regresión lineal de los datos y las líneas grises indican la fecha de casa sondeo.

Capítulo 10

Conclusiones de la segunda parte

10.1. Resumen de resultados obtenidos

En este trabajo se estudió la estructura espacial y temporal del ozono troposférico en Rapa Nui a partir de 186 sondeos realizados entre los años 1994 y 2010 en el marco del programa GAW.

Se identificaron mecanismos de transporte que explican aspectos de la variabilidad de escala climatológica y sinóptica de la estructura espacial y temporal del ozono troposférico sobre Rapa Nui. Se concluyó que:

1. El PH determina las condiciones meteorológicas de fondo sobre la región de estudio, induciendo subsidencia a lo largo de todo el año.
2. El STJ modula -especialmente en la tropósfera alta- las condiciones basales asociadas al PH, presentando mayores variaciones espaciales y temporales respecto de ésta.
3. A finales del verano y principios del otoño el PH y el STJ se encuentran en su posición más lejana respecto de Rapa Nui. Bajo estas condiciones de mínima intensidad del PH y la energía solar disponible inducen el desarrollo de convección, transportando aire pobre en ozono desde la tropósfera baja hacia la tropósfera media.
4. A finales del otoño y a lo largo del invierno el STJ se aproxima latitudinalmente a Rapa Nui -con un máximo de intensidad de viento zonal en agosto producto del posicionamiento su núcleo sobre la isla- permitiendo el transporte de aire rico en ozono desde la estratósfera hacia la tropósfera alta, mediante procesos de mezcla turbulenta. Sin embargo la zona de estabilidad vertical ubicada inmediatamente bajo el núcleo de STJ impide o reduce el transporte hacia las capas medias de la tropósfera, lo cual acumula ozono en la tropósfera alta.
5. En septiembre se mantienen, aunque más debilitadas, las condiciones descritas anteriormente. Sin embargo en octubre se observa una abrupta disminución de la intensidad del STJ sin variaciones latitudinales significativas de su núcleo. Ésto debilita la estabilidad vertical de manera concordante con un máximo relativo de descenso y el máximo anual de la razón de mezcla de ozono en la tropósfera media. Además, durante este periodo el PH muestra su máxima influencia anual sobre la región de estudio.

6. En noviembre el STJ se aleja abruptamente de la isla, llevando el sistema hacia el régimen de verano-otoño.
7. A escala sinóptica las características meteorológicas de la región de estudio están determinadas principalmente por el paso de perturbaciones baroclínicas como sistemas ciclónicos y bajas segregadas, las cuales alcanzan la isla principalmente en invierno. Dependiendo de su intensidad estas perturbaciones pueden transportar aire rico en ozono desde la estratosfera hacia la tropósfera y están asociadas a los perfiles con mayores valores de razón de mezcla de ozono.

Estos resultados -formulados a partir de un análisis estadístico clásico- han sido verificados mediante la aplicación de métodos de agrupamiento, con el objeto de identificar tal estructura interna de los datos sin el prejuicio de hipótesis asociadas a estacionalidades o a mecanismos meteorológicos particulares.

En particular el método SOM -utilizado en estudios análogos, e.g Jensen et al., 2012 [14]- ha mostrado un desempeño satisfactorio. Este método -debido al bajo número de grupos a formar- entrega resultados prácticamente idénticos a los de su análogo de menor complejidad k-means. Sin embargo a medida que aumenta el número predefinido de grupos a formar -producto de un mayor número y/o complejidad de los datos- el método SOM ejecuta de manera más efectiva una etapa de aprendizaje -procedimiento similar a la asimilación de datos- diferenciándose significativamente del método k-means.

Por otro lado, realizó un análisis de tendencia de razón de mezcla de ozono para nueve niveles de presión en la tropósfera -cada 100 hPa entre 900 hPa y 200 hPa-. Se concluyó que:

1. Los datos disponibles no muestran tendencias estadísticamente significativas, salvo para los niveles de 300 hPa y 400 hPa en donde se observa tendencias del orden de -0.6 ppbv por año.
2. La frecuencia de los sondeos es insuficiente para determinar periodicidades, a excepción de los años 1996 y 1997 en donde la mayor cantidad de datos disponibles permite identificar ciclos anuales en la tropósfera baja (el año 1995 tiene un número de sondeos comparable al de los años 1996 o 1997, sin embargo aproximadamente el 50 % de éstos corresponden a sondeos defectuosos).
3. El rango anual de los datos -de 1994 al 2010- no permite detectar variabilidades ENOS.

Considerando los años 1995, 1996 y 1997 en la figura 9.11, se concluye que un estudio de la estructura del ozono en la tropósfera alta y media requiere un muestreo de por lo menos 30 sondeos al año con énfasis en invierno -debido a la mayor frecuencia de sistemas ciclónicos- y en primavera -debido a las significativas variaciones de la posición del STJ-. A esto es importante agregar el hecho de que -probablemente producto del aumento de los valores y de la variabilidad de la razón de mezcla de ozono- el mayor número de sondeos eliminados se da en primavera -figura 8.3-. Lo anterior justifica la necesidad de mantener y mejorar los procedimientos de monitoreo en Rapa Nui.

10.2. Proyecciones del trabajo

Forma parte de las proyecciones de este trabajo de tesis:

1. Realizar un análisis de la turbulencia -a partir del cálculo de la energía cinética turbulenta (TKE) y de los términos asociados a su variación- para validar el mecanismo de transporte turbulento de ozono asociado al STJ.
2. Realizar un análisis de la convección -a partir del cálculo de la energía potencial convectiva disponible (CAPE)- para validar el mecanismo de transporte convectivo asociado a la disminución de la razón de mezcla de ozono durante el régimen verano-otoño.
3. Realizar un análisis de trayectorias para cada sondeo con el objeto de identificar patrones de transporte que validen los mecanismos propuestos en este trabajo y/o que propongan nuevos mecanismos. Para esto se propone -de acuerdo a Jensen et al., 2012 [14]- realizar un agrupamiento de trayectorias utilizando el algoritmo SOM y estudiar la relación entre los grupos de trayectorias y los grupos de sondeos.
4. Determinar la importancia de la formación fotoquímica de ozono troposférico respecto de los mecanismos de transporte propuestos en este trabajo. Para esto se propone realizar un análisis de trayectorias considerando las épocas de quema de biomasa en Australia, África y Sudamérica -Roberts et al., 2008 [25]-. En caso de que la formación fotoquímica tenga un rol significativo se deberán definir metodologías de medición de precursores de ozono en la región de estudio.
5. Estudiar la relación existente entre los datos de Rapa Nui y los datos continentales actualmente disponibles para Santiago y Cerro Tololo.
6. Validar las mediciones y los resultados de este estudio en base a los reanálisis de ozono ECMWF.
7. Evaluar la posibilidad de extender el estudio a la estratósfera, considerando el significativo aumento de datos faltantes por sobre los 15 *km*.

Capítulo 11

Conclusiones generales

En este trabajo se evaluó la aplicabilidad de la Teoría de la Observación y Asimilación al estudio de dos Sistemas de Observación Meteorológica. El primero correspondió a la actual red de monitoreo de la calidad del aire MACAM en la cuenca de Santiago de Chile. Al contar con información proveniente de un modelo de dispersión de CO se pudo aplicar esta teoría -desde una perspectiva variacional- para definir satisfactoriamente indicadores de la calidad de una red -basados en conceptos de precisión, cantidad de información y recuperabilidad- y proponer -a través de éstos- metodologías de diseño basadas en conceptos de extensión, reducción, agrupamiento y optimalidad de la red. El segundo sistema correspondió a un conjunto de 186 sondeos de ozono en Rapa Nui realizados entre el año 1995 y el año 2010 en el marco del programa GAW. Al no contar con un modelo de dispersión de ozono, se aplicó la Teoría de Mapas Auto Organizantes para identificar estructuras internas de los datos, las cuales permitieron proponer mecanismos de transporte relevantes para la estructura del ozono troposférico en la región de estudio. Es importante destacar que la Teoría de Mapas Auto Organizantes -que incluye, desde una perspectiva estocástica, a una gran variedad de métodos de clustering- muestra importantes similitudes con la Teoría de la Observación y Asimilación, pues la primera utiliza de manera similar -aunque desde un punto de vista estadístico- el concepto de asimilación presente en el estimador BLUE.

Capítulo 12

Glosario

El siguiente glosario principalmente está asociado a la notación introducida en la sección 3.

$\mathcal{D}_T = \{t_1, \dots, t_{N_T}\}$	Discretización temporal de tamaño N_T
$\mathcal{D}_E = \{t_1, \dots, t_{N_E}\}$	Discretización espacial de tamaño N_E
$\mathcal{E}_T = \{t_1^e, \dots, t_{N_T^e}^e\} \subseteq \mathcal{D}_T$	Conjunto de instantes de emisión de tamaño N_T^e
$\mathcal{O}_T = \{t_1^o, \dots, t_{N_T^o}^o\} \subseteq \mathcal{D}_T$	Conjunto de instantes de observación de tamaño N_T^o
$\mathcal{E}_E = \{(x_1^e, y_1^e), \dots, (x_{N_E^e}^e, y_{N_E^e}^e)\} \subseteq \mathcal{D}_E$	Conjunto de puntos de emisión de tamaño N_E^e
$\mathcal{O}_E = \{(x_1^o, y_1^o), \dots, (x_{N_E^o}^o, y_{N_E^o}^o)\} \subseteq \mathcal{D}_E$	Conjunto de puntos de observación de tamaño N_E^o
$\mathbb{R}^{N_E^e N_T^e}$	Espacio de Emisión
$\mathbb{R}^{N_E^o N_T^o}$	Espacio de Observación
$\mathcal{H} : \mathbb{R}^{N_E^e N_T^e} \longrightarrow \mathbb{R}^{N_E^o N_T^o}$	Operador de Observación entre los Espacios de Emisión y Observación
H	Matriz Jacobiana del Operador de Observación \mathcal{H} o Matriz de Sensibilidad
$\widehat{\mathcal{H}}$	Operador de Observación Total (caso en que todo el Espacio de Observación es observado)
\widehat{H}	Matriz de Sensibilidad de $\widehat{\mathcal{H}}$
\mathcal{H}_R	Operador de Observación Parcial (caso en que el Espacio de Observación es observado parcialmente a través de la red de monitoreo R)
H_R	Matriz de Sensibilidad de \mathcal{H}_R
$BF_N(\widehat{\mathcal{H}})$	Conjunto de las Matrices de Sensibilidad asociadas a redes de monitoreo de tamaño N

Bibliografía

- [1] Wu, L., Bocquet, M. (2011) Optimal redistribution of the back-ground ozone monitoring stations over France. *Atmospheric Environment* 45(3), 772-783.
- [2] Cuevas, O. (2006) Análisis de ozonosondas en Rapanui: climatología, masas de aire y su impacto en el ozono troposférico. Tesis de Licenciatura, Universidad de Valparaíso, 85 pp.
- [3] Diab, R. D., Raghunandan, A., Thompson, A. M., Thouret, V. (2003) Classification of tropospheric ozone profiles over Johannesburg based on MOZAIC aircraft data. *Atmos. Chem. and Fis.* Vol.3, 705-732.
- [4] Fisher, M. (2003) Estimation of Entropy Reduction and Degrees of Freedom for Signal for Large Variational Analysis Systems. ECMWF Technical Memoranda.
- [5] Fuenzalida, H. (2011) Eighth meeting of the Ozone Research Managers of the Parties to the Vienna Convention for the Protection of the Ozone Layer. Report from Chile.
- [6] Fuenzalida, H., Sánchez, R., Garreaud, R. (2005) A Climatology of Cutoff Lows in the Southern Hemisphere. *J. Geophys. Res.* Vol. 110, doi:10.1029/2005JD005934.
- [7] Gallardo, L., Carrasco, J., Olivares, G. (2000) An analysis of ozone measurements at Cerro Tololo (30°S, 70°W, 2200 m.a.s.l) in Chile. *Tellus B*, 52-59.
- [8] Gallardo, L., Quintana, J., Cordova, A., Thompson, A. (2005) Ozone soundings on Easter Island (27°S, 109°W, 51 m.a.s.l) since 1995: representativity and variability analyses. Manuscrito.
- [9] Garreaud, R., Rutlland, J. (2006) Episodios Críticos de Contaminación Atmosférica en Santiago. R. Morales Ed. Colección de Química Ambiental. Editorial Universitaria. Cap. 2, 36-53.
- [10] Golub, G., Van Loan, C. (1996) *Matrix Computations*. Johns Hopkins University. Third edition.
- [11] Holton, J. (2004) *An Introduction to Dynamic Meteorology*. Elsevier Inc. Fourth edition.
- [12] WMO/IGAC (2012) Impact of Megacities on Air Pollution and Climate, GAW report 205.
- [13] www.cooperativa.cl/incendio-consumio-edificio-de-la-universidad-austral-en-valdivia. Consultado en enero del año 2013.

- [14] Jensen, A., Thompson, A., Schmidlin, F. (2012) Classification of Ascension Island and Natal Ozonesondes Using Self-Organizing Maps. Manuscript.
- [15] Johnson, C. (2003) Information Content of Observations in Variational Data Assimilation. PhD Thesis, University of Reading, 210 pp.
- [16] Kalnay, E. (2003) Atmospheric modeling, data assimilation and predictability. Cambridge University. First edition.
- [17] Keable, M., Simmonds, I., Keay, K. (2002) Distribution and Temporal Variability of 500 hPa Cyclone Characteristics in the Southern Hemisphere. *Int. J. Climatol.* Vol. 22, 131-150.
- [18] Kirkpatrick, S., Gellat, C., Vecchi, M. (1983) Optimization by simulated annealing. *Science*. Vol. 220, 671-680.
- [19] Kohonen, T. (1990) The Self-Organizing Map. *Proceedings of the IEEE*. Vol.78, No. 9.
- [20] Kohonen, T. (2001) Self-Organizing Maps. *Springer*. Third edition.
- [21] Logan, J. (1985) Tropospheric Ozone: Seasonal Behavior, Trends and Anthropogenic Influence. *Journal of Geophysical Research*. Vol. 90, 10,463-10,482.
- [22] Lovengreen, C., Fuenzalida, H., Villanueva, L. (2000) Ultraviolet solar radiation at Valdivia, Chile (39.8°S). *Atmos. Env.* Vol. 34, 4051-4061.
- [23] Muñoz, R., Undurraga, A. (2010) Daytime Mixed Layer over the Santiago Basin: Description of Two Years of Observations with a Lidar Ceilometer. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, 49, 1728-1741.
- [24] Osses, A., Gallardo, L., Faúndez, T. (2012) Combining statistical information tools for the analysis of air quality monitoring networks. *Tellus*. Manuscript.
- [25] Roberts, G., Wooster, M., Lagoudaki, E. (2008) Annual and diurnal African biomass burning temporal dynamic. *Biogeosciences Discuss.* Vol. 5, 3623-366.
- [26] Rondanelli, R., Gallardo, L., Garreaud, R. (2002) Rapid changes in ozone mixing ratios at Cerro Tololo (30°10'S, 70°48'W, 2200 m) in connection with cutoff lows and deep troughs. *Journal of Geophysical Research*. Vol. 107, No. D23, 4677, doi:10.1029/2001JD001334.
- [27] Saide, P. (2008) Emisiones de monóxido de carbono en Santiago de Chile: distribución espacial y optimización por modelación inversa. Tesis de grado, Universidad de Chile, 154 pp.
- [28] Saide, P., Bocquet, M., Osses, A., Gallardo, L. (2011) Constraining surface emissions of air pollutants using inverse modeling: method intercomparison and a new two-step two-scale regularization approach. *Tellus B* (en prensa).
- [29] Vesanto, J., Himberg, J., Alhoniemi, I., Parhankangas, J. (2000) SOM Toolbox for Matlab 5. Helsinki University of Technology. Report A57.

-
- [30] Thompson, A., Witte, J., McPeters, R. (2003) Southern Hemisphere Additional Ozone-sondes (SHADOZ) 1998-2000 tropical ozone climatology 1. Comparison with Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS) and ground-based measurements. *Journal of Geophysical Research*, Vol. 108. No. D2, 8238, doi:10.1029/2001JD000967.
- [31] Thompson, A., Witte, J. (2003) Southern Hemisphere Additional Ozone-sondes (SHADOZ) 1998-2000 tropical ozone climatology 2. Tropospheric variability and the zonal wave-one. *Journal of Geophysical Research*, Vol. 108. No. D2, 8241, doi:10.1029/2002JD002241.
- [32] Trosset, M. (2008) Representing Clusters: K-Means Clustering, Self-Organizing Maps and Multidimensional Scaling. Technical Report 08-03, Department of Statistics, Indiana University.
- [33] Huella de carbono. Rapa Nui, isla de Pascua. (2012) Instituto de Estudios Urbanos y Territoriales UC.
- [34] Valdés, R. (2003) Análisis de sondeos de ozono troposférico realizados en Isla de Pascua (1996-2002): tendencias y representatividad. Tesis de grado, Universidad de Chile.

Apéndice A

Ecuaciones de la Meteorología y de la Dispersión

Denotemos por $\vec{\Omega}$ al vector velocidad angular terrestre, por ρ al campo de densidad del aire seco, por P al campo de presión del aire seco, por T al campo de temperatura del aire seco y por \vec{V} al campo tridimensional de velocidad del viento relativa al movimiento de rotación terrestre dado por $\vec{\Omega}$.

De la *Ley de Conservación del Momentum Lineal* se tiene que

$$\partial_t \vec{V} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} + \frac{1}{\rho} \nabla P = -2\vec{\Omega} \times \vec{V} + \vec{f} \quad (\text{A.1})$$

en donde \vec{f} corresponde a un campo vectorial de fuerzas externas, definido por unidad de masa. La dependencia de \vec{f} con respecto a la meteorología estará dada por los fenómenos dinámicos externos que se deseen incluir en el balance de momentum.

De la *Ley de Conservación de la Masa* se tiene que

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (\text{A.2})$$

De la *Ley de los Gases Ideales* se tiene que

$$P = \rho RT \quad (\text{A.3})$$

en donde R corresponde a la Constante Universal de los Gases Ideales.

De la *Ley de Conservación de la Energía* se tiene que

$$c_p(\partial_t T + (\vec{V} \cdot \nabla)T) - \frac{1}{\rho}(\partial_t P + (\vec{V} \cdot \nabla)P) = Q \quad (\text{A.4})$$

en donde c_p corresponde al calor específico del aire seco a presión constante y Q corresponde a un campo escalar de flujo de energía externa, definido por unidad de masa. La dependencia de Q con respecto a la meteorología estará dada por los fenómenos externos de transmisión de energía que se desee incluir en el balance energético.

Ejemplo de ésto son forzantes radiativos (interdiarios o estacionales), intercambio de energía entre los sistemas acoplados tierra-atmósfera y océano-atmósfera, flujos de energía por reacción químicas asociados a la presencia de especies químicas en la atmósfera y flujos de energía asociados a la presencia de agua en la atmósfera (cambios de fase, nubosidad).

Si c denota la concentración de una especie química relevante en el balance energético del sistema, entonces de la Ley de Conservación de la Masa se tiene que

$$\partial_t c + \nabla \cdot (c \vec{V}) = F_c - S_c \quad (\text{A.5})$$

en donde F_c y S_c corresponden, respectivamente, a los campos escalares fuente y sumidero de la especie, definidos por unidad de masa, los cuales pueden o no depender de la meteorología y de la presencia de ésta u otras especies.

En general, el vapor de agua es relevante para el balance energético atmosférico, por lo cual para su razón de mezcla q se considerará su ecuación de conservación

$$\partial_t(\rho q) + \nabla \cdot (\rho q \vec{V}) = F_q - S_q \quad (\text{A.6})$$

con campos fuente y sumidero fuertemente acoplados a la meteorología.

En el caso en que la especie corresponde a un contaminante atmosférico, denotaremos por e a la componente de F_c correspondiente a fuentes antropogénicas y naturales; refiriendonos a élla como *emisión*.

Finalmente, nos referiremos como *Ecuaciones de la Meteorología* al conjunto de ecuaciones (A.1), (A.2), (A.3), (A.4) y (A.6). Para un conjunto de N especies c_1, \dots, c_N nos referiremos como *Ecuaciones de la Dispersión* al conjunto de las N ecuaciones de la forma (A.5).

Modelos Numéricos OFF-LINE y ON-LINE

Si \vec{f} , Q , F_q y S_q no dependen de ninguna de las especies c_1, \dots, c_N , entonces las Ecuaciones de la Meteorología se desacoplan de las Ecuaciones de la Dispersión, formando un sistema cerrado para las 7 variables ρ , P , T , q y \vec{V} . Un modelo numérico que resuelva primero las Ecuaciones de la Meteorología y que luego, utilizando las variables meteorológicas como parámetros ya conocidos, resuelva las Ecuaciones de la Dispersión se denominará *modelo OFF-LINE*.

Si \vec{f} , Q , F_q o S_q dependen de alguna de las especies c_1, \dots, c_N entonces las Ecuaciones de la Meteorología no se desacoplan de las Ecuaciones de la Dispersión, formando un sistema cerrado para las $7 + N$ variables c_1, \dots, c_N , ρ , P , T , q y \vec{V} . Un modelo numérico que resuelva conjuntamente las Ecuaciones de la Meteorología y las Ecuaciones de la Dispersión se denominará *modelo ON-LINE*.

Forma particular de la Ecuación de la Dispersión

Consideremos la Ecuación de la Dispersión dada en (A.5)

$$\partial_t c + \nabla \cdot (c \vec{V}) = F_c - S_c \quad (\text{A.7})$$

Aplicando la *descomposición de Reynolds*

$$\begin{aligned} c &= \bar{c} + c' & \vec{V} &= \overline{\vec{V}} + \vec{V}' \\ F_c &= \overline{F_c} + F'_c & S_c &= \overline{S_c} + S'_c \end{aligned}$$

esta ecuación toma la forma

$$\partial_t \bar{c} + \nabla \cdot (\bar{c} \overline{\vec{V}}) + \nabla \cdot (c' \overline{\vec{V}'}) = \overline{F_c} - \overline{S_c} \quad (\text{A.8})$$

Considerando la parametrización del flujo turbulento $c' \overline{\vec{V}'} = \nabla \bar{c}$ y suponiendo incompresibilidad del viento medio $\nabla \cdot \overline{\vec{V}} = 0$, la ecuación (A.8) toma la forma

$$\partial_t \bar{c} - \Delta \bar{c} + \overline{\vec{V}} \cdot \nabla \bar{c} = \overline{F_c} - \overline{S_c} \quad (\text{A.9})$$

El desarrollo anterior indica cómo la ecuación (A.9) se desprende de la ecuación de dispersión original (A.5), siendo, en estricto rigor, una aproximación válida para los valores medios de las variables en la medida en los supuesto que se han hecho sean razonables. Más aun, cuando tales supuestos, de incompresibilidad y parametrización, se verifican satisfactoriamente, se suele considerar que la ecuación (A.9) es válida para los valores originales de las variables y se toma como Ecuación de la Dispersión a la ecuación

$$\partial_t c - \Delta c + \vec{V} \cdot \nabla c = F_c - S_c \quad (\text{A.10})$$

Apéndice B

Métodos de Agrupamiento K-MEANS y SOM

B.1. K-MEANS

Sea $m, n, k \in \mathbb{N}$ y $\Omega = \{x_1, \dots, x_m\} \subset \mathbb{R}^n$. Denotemos por $P_k(\Omega)$ al conjunto de las particiones de Ω de tamaño k . Consideremos una distancia d en \mathbb{R}^n . Para $\{C_1, \dots, C_k\} \in P_k(\Omega)$ y $\{m_1, \dots, m_k\} \subset \mathbb{R}^n$ definamos el funcional

$$W(C_1, \dots, C_k; m_1, \dots, m_k) = \sum_{j=1}^k \sum_{x_i \in C_j} d^2(x_i, m_j) \quad (\text{B.1})$$

En este contexto Ω corresponde a un conjunto de datos, para el cual se desea encontrar una partición o *cluster* C_1, \dots, C_k , con *representantes* m_1, \dots, m_k , que permita observar una eventual estructura interna del conjunto de datos. Cada sumando del funcional definido en (B.1) corresponde a una medida de la dispersión al interior del conjunto C_j con respecto a su representante m_j .

El método de agrupamiento k -means consiste en determinar el cluster para el cual la dispersión interna total del conjunto de datos es mínima, a partir de la resolución del siguiente problema de optimización

$$\min_{\substack{\{C_1, \dots, C_k\} \in P_k(\Omega) \\ \{m_1, \dots, m_k\} \subset \mathbb{R}^n}} W(C_1, \dots, C_k; m_1, \dots, m_k) \quad (\text{B.2})$$

La resolución de este problema puede ser abordada a partir de sus proyecciones sobre el conjunto de los clusters o sobre el conjunto de los representantes.

1. Proyección sobre el conjunto de los clusters.

Dado un cluster C_1, \dots, C_k definamos

$$\bar{x}(C_j) = \frac{1}{|C_j|} \sum_{x_j \in C_j} x_j$$
$$\bar{W}(C_1, \dots, C_k) = W(C_1, \dots, C_k; \bar{x}(C_1), \dots, \bar{x}(C_k))$$

Consideremos el problema de optimización con dominio discreto

$$\min_{\{C_1, \dots, C_k\} \in P_k(\Omega)} \overline{W}(C_1, \dots, C_k) \quad (\text{B.3})$$

Dado que el problema (B.3) es una restricción del problema (B.2) y dado que, a partir de la aplicación de técnicas de optimización multivariada, es posible probar que $\overline{W} \leq W$, se tendrá que los problemas (B.3) y (B.2) son equivalentes. El algoritmo típicamente utilizado para la resolución del problema (B.3) corresponde al algoritmo de MacQueen -Trosset, 2008 [32]-.

2. Proyección sobre el conjunto de los representantes.

Dado un cluster C_1, \dots, C_k , sus representantes m_1, \dots, m_k y un dato x_j denotemos por $C(x_j)$ al elemento del cluster al cual pertenece x_j , por $m(x_j)$ al representante del elemento del cluster $C(x_j)$ y por $m_*(x_j)$ a un representante que verifique $\forall i \in \{1, \dots, k\} : d(m_*(x_j), x_j) \leq d(m_i, x_j)$.

Definamos

$$\begin{aligned} \tilde{C}(m_j) &= \{x_i \in \Omega : m_*(x_i) = m_j\} \\ \widetilde{W}(m_1, \dots, m_k) &= W(\tilde{C}(m_1), \dots, \tilde{C}(m_k); m_1, \dots, m_k) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Consideremos el problema de optimización a dominio continuo

$$\min_{\{m_1, \dots, m_k\} \subset \mathbb{R}^n} \widetilde{W}(m_1, \dots, m_k) \quad (\text{B.5})$$

Dado que el problema (B.5) es una restricción del problema (B.2) y dado que, por definición de \widetilde{W} se tiene que $\widetilde{W} \leq W$, se tendrá que los problemas (B.5) y (B.2) son equivalentes. La continuidad del dominio en (B.5) permite aplicar algoritmos de optimización continua para la resolución de este problema.

Los algoritmos utilizados para la resolución de los problemas (B.3) y (B.5) requieren un cluster y un conjunto de representantes iniciales, respectivamente. Entre las alternativas para la determinación de estos parámetros iniciales destaca el caso en donde los representantes son seleccionados mediante muestreo aleatorio y el caso en donde se utilizan como representantes las componentes principales asociadas a los datos. Posteriormente, de ser necesario, el cluster inicial puede construirse a partir de los representantes iniciales según la relación (B.4).

Nota: Sea $\{v_1, \dots, v_m\} \subset \mathbb{R}^n$ el conjunto de componentes principales asociadas a Ω , tomemos $\forall j \in \{1, \dots, k\} : m_j = v_j$ y $C_j = \tilde{C}(v_j)$. El significado estadístico desde el cual se definen las componentes principales hacen que sea interesante considerar el cluster que éstas inducen cuando son tomadas como representantes iniciales.

Por otro lado la ortogonalidad de las componentes principales puede ser utilizada para

visualizar parcialmente los datos a través su proyección sobre un espacio de baja dimensión. En efecto, sea $l \in \{1, \dots, m\}$ (típicamente $l = 2$ o $l = 3$) y consideremos la función lineal

$$\begin{aligned} \varphi: \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R}^l \\ x &\longmapsto \varphi(x) = (p_{v_1}(x), \dots, p_{v_l}(x)) \end{aligned}$$

en donde el escalar $p_{v_j}(x)$ corresponde a la proyección ortogonal de x sobre v_j . Luego, dado un cluster C_1, \dots, C_k , los conjuntos proyectados $\varphi(C_1), \dots, \varphi(C_k)$ permiten visualizar el agrupamiento de los datos en el espacio de baja dimensión \mathbb{R}^l . Nos referiremos a esto como *Mapa de Proyección*.

Es importante notar que los conjuntos $\varphi(C_1), \dots, \varphi(C_k)$ no son necesariamente disjuntos dos a dos y que para $l < n$ la función φ no es biyectiva.

B.2. SOM

Un mapa auto organizante (SOM, Self Organizing Map) es un procedimiento que convierte la relaciones estadísticas -eventualmente no lineales- presentes en un conjunto de datos de entrada -típicamente de alta dimensión- en relaciones geométricas simples -visualizables en espacios de baja dimensión- que preserven las estructuras topológicas y geométricas más relevantes de los datos (Kohonen et al., 1990 [20]).

Sea $m, n, k \in \mathbb{N}$. Sea $\Omega = \{x_1, \dots, x_m\} \subset \mathbb{R}^n$ que denominaremos *datos de entrada* y sea $T > 0$ que denominaremos *horizonte temporal de aprendizaje*. Denotemos por $P_k(\Omega)$ al conjunto de las particiones de Ω de tamaño k . Consideremos una distancia d en \mathbb{R}^n .

Consideremos las siguientes definiciones

1. Sea $R = \{r_1, \dots, r_k\} \subset \mathbb{R}^2$ (o \mathbb{R}^3) que denominaremos *conjunto de nodos* o *grilla*.

Dotaremos a este conjunto de una *topología* que permita introducir los conceptos de adyacencia entre nodos y vecindad en torno a nodos. Para $r_i \in R$ y $\sigma \geq 0$, el conjunto $N_\sigma(r_i) \subset R$ denotará la vecindad en torno a r_i de radio σ . Las vecindades de los nodos frontera quedaran determinadas a partir de una *forma global* de la grilla.

La figura B.1 muestra las vecindades inducidas por topologías de tipo hexagonal y rectangular, y la figura B.2 muestra, para una grilla con topología rectangular, formas globales de tipo planar, cilíndrico y toroidal.

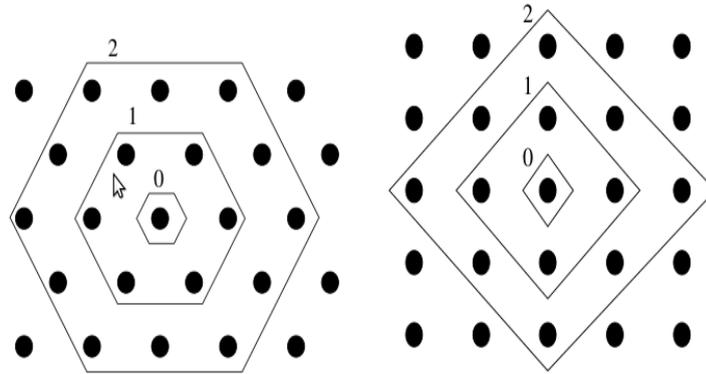


Figura B.1: Vecindades inducidas por topologías de tipo hexagonal (izquierda) y rectangular (derecha), para radios 0, 1 y 2. Adaptado de SOM Toolbox Report, 2000 [29].

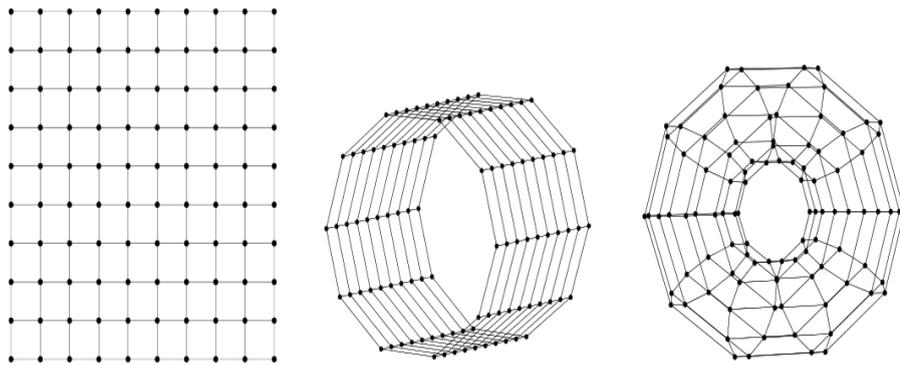


Figura B.2: Formar globales, para una grilla con topología rectangular, de tipo planar (izquierda), cilíndrico (centro) y toroidal (derecha). Adaptado de SOM Toolbox Report, 2000 [29].

2. $\forall i \in \{1, \dots, k\}$ consideremos las funciones

$$\begin{aligned} m_i : [0, T] &\longrightarrow \mathbb{R}^n \\ t &\longmapsto m_i(t) \end{aligned}$$

que denominaremos *vectores de peso*.

Finalmente fijemos una biyección entre el conjunto de nodos y los vectores de peso.

3. Consideremos la función decreciente

$$\begin{aligned} \sigma : [0, T] &\longrightarrow \mathbb{R} \\ t &\longmapsto \sigma(t) \end{aligned}$$

que denominaremos radio de vecindad.

4. $\forall i, j \in \{1, \dots, k\}$ consideremos las funciones

$$\begin{aligned} h_{ij} : [0, T] &\longrightarrow \mathbb{R} \\ t &\longmapsto h_{ij}(t) \end{aligned}$$

que denominaremos funciones de vecindad asociadas a los nodos r_i y r_j . Típicamente se utilizan las siguientes formas explícitas para estas funciones

$$\begin{aligned} h_{ij}(t) &= H(\sigma(t) - d_{ij}) \\ h_{ij}(t) &= e^{-\frac{d_{ij}}{2\sigma^2(t)}} \\ h_{ij}(t) &= e^{-\frac{d_{ij}}{2\sigma^2(t)}} H(\sigma(t) - d_{ij}) \\ h_{ij}(t) &= \max\{0, 1 - (\sigma(t) - d_{ij})^2\} \end{aligned}$$

en donde $H(a) = 0$, si $a < 0$ y $H(a) = 1$, si $a \geq 0$, y $d_{ij} = d(r_i, r_j)$. Estas funciones se denominan bubble, gaussian, cutgauss y ep, respectivamente, y dependen de las características de la grilla correspondiente.

Consideremos la función decreciente

$$\begin{aligned} \alpha : [0, T] &\longrightarrow \mathbb{R} \\ t &\longmapsto \alpha(t) \end{aligned}$$

que denominaremos tasa de aprendizaje. Típicamente se utilizan las siguientes formas explícitas para esta función

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= \alpha_0 \left(1 - \beta_1 \frac{t}{T}\right) \\ \alpha(t) &= \alpha_0 \left(\frac{\beta_2}{\alpha_0}\right)^{\frac{t}{T}} \\ \alpha(t) &= \frac{\alpha_0}{1 + \beta_3 \frac{t}{T}} \end{aligned}$$

en donde $\alpha_0 > 0$ corresponde a la tasa inicial de aprendizaje y $\beta_1, \beta_2, \beta_3 > 0$ son parámetros fijos ($\beta_2 < \alpha_0$). Estas funciones se denominan linear, power e inv, respectivamente.

Sea $N \in \mathbb{N}$ y $0 = t_0 < t_1, \dots, t_N \leq T$ una discretización del intervalo $[0, T]$. El algoritmo de aprendizaje es el siguiente

1. Inicialización.

Asignar valores iniciales a los vectores de peso $m_1(t_0), \dots, m_k(t_0)$, típicamente escogidos aleatoriamente o bien obtenidos a partir de las k primeras componentes principales asociadas al conjunto de datos.

2. Aprendizaje.

Para $l \in \{1, \dots, N - 1\}$ seleccionar aleatoriamente un dato $x(t_l) \in \Omega$.

Identificar el valor del vector de peso $m_c(t_l)$ más cercano a $x(t_l)$ -también denominado vector BMU (Best Matching Unit)-, es decir

$$\forall i \in \{1, \dots, k\} : d(x(t_l), m_c(t_l)) \leq d(x(t_l), m_i(t_l)) \quad (\text{B.6})$$

Actualizar el valor de los vectores de peso según la relación

$$\forall i \in \{1, \dots, k\} : m_i(t_{l+1}) = m_i(t_l) + \alpha(t_l)h_{ci}(t_l)(x(t_l) - m_i(t_l)) \quad (\text{B.7})$$

Es decir, luego de haber seleccionado aleatoriamente un dato $x(t_l)$, los valores del vector BMU $m_c(t_l)$ y de los vectores de peso $m_i(t_l)$ asociados a los nodos vecinos de r_c , con énfasis en aquellos $m_i(t_l)$ que verifican $r_i \in N_{\sigma(t_l)}(r_c)$, son modificados mediante una traslación rectilínea de factor $\alpha(t_l)h_{ci}(t_l)$ en la dirección del valor del dato $x(t_l)$. La figura B.3 muestra un esquema de este proceso.

Por esta razón esta etapa del algoritmo se denomina de *aprendizaje* y presenta ciertas similitudes con la Teoría de Asimilación de Datos mediante Modelación Inversa (Kalnay, 2003 [16]).

3. Agrupamiento.

Definir el cluster de los datos tomando como representantes $m_1(t_N), \dots, m_k(t_N)$ según la relación (B.4).

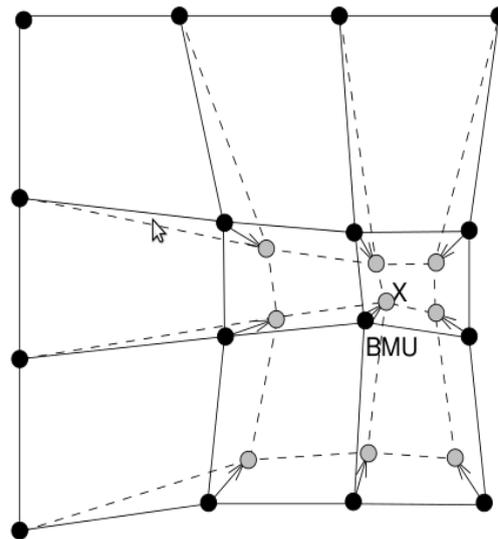


Figura B.3: Actualización de los valores de los vectores de peso a lo largo del proceso de aprendizaje. El conjunto de datos de entrada es de dimensión $n = 2$. Los puntos grises y negros corresponden a los valores de los vectores de peso después y antes de la actualización, respectivamente. Las líneas segmentadas y continuas que conectan los puntos hacen

referencia a la relación topológica presente en el conjunto de nodos correspondiente. La X corresponde al dato seleccionado aleatoriamente y las flechas indican la modificación de los valores de los vectores de peso correspondientes. Adaptado de SOM Toolbox Report, 2000 [29].

El resultado final del proceso de aprendizaje es obtener un conjunto de valores finales para los vectores de peso que sea representativo de los datos de entrada y que permita observar una eventual estructura grupal en los datos.

En cuanto a método de agrupamiento, SOM es una generalización estocástica del método k -means, en el sentido descrito en Trosset, 2008 [32], existiendo mayor similitud entre estos métodos a medida que disminuye el número de nodos k .

Nota: Existe una variante de la etapa de aprendizaje del algoritmo -denominada Batch Training- según la cual los valores de todos los vectores de peso son actualizados a la vez, esto es:

Para $l \in \{1, \dots, N - 1\}$

1. Determinar $\forall j \in \{1, \dots, m\} : c_j \in \arg \min_{i \in \{1, \dots, k\}} d(x_j, m_i(t_l))$

2. Actualizar $\forall i \in \{1, \dots, k\} : m_i(t_{l+1}) = \frac{\sum_{j=1}^m h_{ic_j}(t_j) x_j}{\sum_{j=1}^m h_{ic_j}(t_j)}$

Apéndice C

Pseudocódigo del algoritmo Recocido Simulado

A continuación se presenta un pseudocódigo con el esquema general del algoritmo Recocido Simulado utilizado en este trabajo en términos de la notación introducida en la sección 3.3.3. Por simplicidad en la notación admitiremos el siguiente abuso de notación: $g(R) = g(H_R)$.

```
1 INICIALIZACION:  
2  
3 Red inicial y el valor inicial de la funcion objetivo:  
4 R_ini  
5 g_ini=g(R_ini)  
6  
7 Mejor red y el valor inicial del mejor valor de la funcion objetivo:  
8 R_best=R_ini  
9 g_best=g_ini  
10  
11 Red de prueba:  
12 R_test=R_ini  
13  
14 Temperatura inicial del algoritmo  
15 y los factores de crecimiento-decrecimiento de la temperatura:  
16 T_ini  
17 alfa < 1  
18 eta > 1  
19  
20 Numero de iteraciones:  
21 N  
22 Numero inicial de intentos de movimiento  
23 y el factor de crecimiento del numero de intentos de movimiento:  
24 K_ini  
25 rho  
26 Numero minimo requerido de movimientos realizados ,  
27 ya sea por descenso de la funcion objetivo o por aceptacion aleatoria:  
28 A  
29  
30 Radios maximo y minimo de perturbacion:  
31 r_M  
32 r_m  
33  
34 Red de trabajo y valor de trabajo de la funcion objetivo:  
35 R=R_ini  
36 g=g_ini  
37  
38 Para i de 1 a N:  
39 K(i) es el numero de intentos de movimiento en la iteracion i y K(1)=K_ini
```

```

40 r(i) es el radio de perturbacion en la iteracion i y r(1)=r_M
41 T(i) es la temperatura en la iteracion i y T(1)=T_ini
42
43 EJECUCION DEL ALGORITMO
44
45 for i = 1:N
46
47     a = 0
48     k = 0
49
50     Actualizacion del radio de perturbacion
51     r(i+1)=r_m+floor((N-i)*(r_M-r_m)/(N-1))
52     NOTA 2: r(i) decrece con i hasta su valor minimo r_m
53             y floor denota al cajon inferior.
54
55     while k<=K y a<A
56
57         k=k+1
58
59         R_test=perturbacion de R con radio de perturbacion r(i)
60         g_test=g(R_test)
61
62         delta=g_test-g
63
64         if delta<=0      (esto implica que g_test<=g, lo cual quiere
65                         decir que la red test R_test permite
66                         disminuir la funcion objetivo)
67
68             p=1          (probabilidad 1 de movimiento de descenso)
69             R=R_test     (la red perturbada pasa a ser la red de trabajo)
70             g=g_test
71
72             a=a+1        (incremento en el numero de movimiento realizados,
73                         en este caso un movimiento de descenso)
74
75
76             if g<=g_best
77
78                 R_best=R
79                 g_best=g
80
81             end
82
83
84
85
86         else            (esto implica que g_test>g, lo cual quiere decir que
87                         la red R_test no permite disminuir la funcion objetivo)
88
89             p=exp(-delta/T) (probabilidad de movimiento, sin descenso)
90
91             if rand()<p    (esto implica que hay movimiento)
92
93                 R=R_test   (la red perturbada pasa a ser la red de trabajo)
94                 g=g_test
95
96                 a=a+1      (incremento en el numero de movimiento realizados,
97                             en este caso un movimiento no de descenso)
98
99             else          (esto implica que no hay movimiento y por lo tanto
100                          la red test R_test es rechazada)
101             end
102
103         end
104
105     end del while
106
107
108
109 -Si el algoritmo no es monotono en la temperatura
110

```

```

111     if a=A (esto implica que el algoritmo realiza una cantidad aceptable
112             de movimientos, ya sean de descenso o no. Luego
113             es razonable limitar el rango de movimiento del algoritmo para
114             ser mas especifico en la busqueda del optimo. Esta limitacion
115             del rango de movimiento se hara para los movimientos aceptados
116             de forma aleatoria, lo cual se consigue disminuyendo el valor
117             de la temperatura.)
118
119             T(i+1)=alfa*T(i)
120
121     else (por el contrario, esto implica que el algoritmo no realiza una
122           cantidad aceptable de movimientos, ya sean de descenso o no.
123           Luego es necesario ampliar el rango de movimiento del algoritmo
124           para hayar una region de descenso. Esta ampliacion
125           del rango de movimiento se hara para los movimiento aceptados
126           de forma aleatoria, lo cual se consigue aumentando el valor de la
127           temperatura.)
128
129             T(i+1)=eta*T(i)
130     end
131
132 -Si el algoritmo es monotono en la temperatura
133
134             T(i+1)=alfa*T(i)
135
136 -Actualizacion del numero de intentos de movimiento
137
138             K(i+1)=rho*K(i)
139
140 -Modificaciones al algoritmo dependiendo del rango de iteraciones en donde se encuentra
141
142     if i>N/3
143
144         R=R_best (esto implica que a partir del primer tercio de la ejecucion
145                 del algoritmo cada nueva iteracion (i) se hace a partir
146                 de la mejor red obtenida en la iteracion anterior (i-1))
147         g=g_best
148
149     end
150
151 end del for
152
153 Finalmente, la sucesion de descenso corresponde al par (R_best(i),g_best(i)).

```

El tiempo de cómputo del algoritmo depende principalmente del número de evaluaciones de la función objetivo. Notemos que para cada $i \in \{1, \dots, N\}$ se realizan a lo más $K(i)$ evaluaciones de la función objetivo al interior del ciclo *while* (línea de código 55). Por lo tanto el número total de dichas evaluaciones está dado por

$$\sum_{i=1}^N K(i) = \sum_{i=1}^N K(1)\rho^{i-1} = K(1) \left(\frac{\rho^N - 1}{\rho - 1} \right) \quad (\text{C.1})$$