



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE
HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS

MODELO DINÁMICO DE LAS VARIABLES CLIMÁTICAS
GLOBALES DE LA TIERRA

T E S I S

PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA FÍSICA

P R E S E N T A :

LUIS FELIPE MENDOZA MENDOZA

TUTOR

DR. FRANCISCO SHIDARTHA GUZMÁN MURILLO



MORELIA, MICHOACÁN, FEBRERO 2026

Agradecimientos

Este trabajo de tesis es el resultado de cuatro años de esfuerzo y dedicación. Durante este periodo hubo contratiempos, incluso momentos en los que el proyecto pareció peligrar. Afortunadamente, esto no ocurrió gracias al apoyo de varias personas, confirmando el refrán: «camina solo y llegarás más rápido; camina acompañado y llegarás más lejos».

Agradezco en primer lugar a mi asesor, el Dr. Francisco Guzmán, quien supo detectar a tiempo las deficiencias y proponer los cambios necesarios para culminar esta tesis. También al equipo de trabajo, especialmente a Iván Álvarez, cuyos aportes mejoraron de forma significativa la implementación del algoritmo genético.

A mi familia, a quienes mantuve al margen de muchos contratiempos para evitarles preocupaciones innecesarias, aunque siempre supieron cuando algo no iba bien. Un énfasis especial para mi madre, quien fue clave en mi decisión de continuar el doctorado en física aplicada.

A mis amigos que han acompañado este camino: Selene y Mario desde el inicio de la vida universitaria; Marcos y Mike, con quienes hoy puedo compartir en persona; Jesús, Romero y Adolfo, por sus consejos. Y, de manera especial, a Tania, quien pasó de amiga a compañera de vida: que la vida te siga pintando de amarillo.

Finalmente, al trío felino que mantiene la armonía en casa -Michi, Bulmaro y el recién llegado Ofelio-, además de Alexandra Elbakyan, para quienes entienden la referencia. Y a los libros y videojuegos que ayudaron a aliviar el estrés de cada semestre.

Largos días y placenteras noches.

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	VI
Abstract	VII
1. Introducción	1
1.1. Calentamiento global ¿mito o realidad?	2
1.2. La temperatura global a finales del siglo XIX	2
1.3. El clima de la Tierra, su causa	4
1.4. El clima terrestre y el espacio exterior	6
1.4.1. El Sol	6
1.4.2. Ciclos de Milanković	9
1.5. Gases de efecto invernadero	14
1.5.1. Dióxido de carbono	14
1.5.2. Vapor de agua	18
1.5.3. Metano	18
1.5.4. Óxido nitroso	20
1.6. Participantes silenciosos	21
Bibliografía	25
2. La matemática que hay detrás	32
2.1. Ecuaciones diferenciales	33

2.2. Clasificación de Ecuaciones Diferenciales	34
2.2.1. Ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales	34
2.2.2. Orden	35
2.2.3. Ecuaciones lineales y no lineales	35
2.2.4. Sistemas de ecuaciones diferenciales	35
2.3. Existencia de soluciones	36
2.4. Problema de Valores Iniciales	37
2.4.1. Ejemplo	37
2.5. Método de Euler	38
2.5.1. Derivación del método de Euler por series de Taylor	40
2.5.2. Convergencia	41
2.5.3. Aplicación del método de Euler	42
2.6. Métodos de Runge-Kutta	44
2.6.1. Runge-Kutta 2do orden	45
2.6.2. Métodos de Runge-Kutta de 4to Orden	48
2.7. Modelo matemático	48
2.7.1. Oscilaciones	49
2.7.2. Oscilador armónico simple	49
2.7.3. Oscilador armónico amortiguado	51
2.7.4. Solución numérica de osciladores armónicos	53
2.7.5. Convergencia de los métodos RK	54
2.7.6. Oscilador forzado amortiguado	57
2.7.7. Autoconvergencia	59
2.7.8. Osciladores no lineales	60
Bibliografía	63
3. Algoritmo Genético	64
3.1. Funcionamiento de un algoritmo genético	65
3.1.1. Población inicial	65

3.1.2.	Función de fortaleza	66
3.1.3.	Selección	67
3.1.4.	Cruzamiento	69
3.1.5.	Mutación	72
3.2.	Ventajas de los algoritmos genéticos	74
3.3.	Limitaciones de los algoritmos genéticos	75
3.4.	Validación del algoritmo genético	76
3.4.1.	Modelo SIR	77
3.4.2.	Reacción de primer orden reversible	78
3.4.3.	Proceso de conversión Metanol-Hidrocarburos	81
3.4.4.	Difusión de enzimas	84
	Bibliografía	87
4.	Modelado del calentamiento global	90
4.1.	Generalidades en los modelos	90
4.2.	Fuentes fósiles	92
4.2.1.	Emisiones fósiles de CO ₂	94
4.2.2.	Emisiones fósiles de CH ₄	97
4.2.3.	Emisiones fósiles de N ₂ O	98
4.3.	Cambio de uso de suelos	100
4.3.1.	Emisiones LULUCF de CO ₂	101
4.3.2.	Emisiones LULUCF de CH ₄	105
4.3.3.	Emisiones LULUCF de N ₂ O	106
4.4.	Fracciones molares	108
4.4.1.	Concentración de CO ₂ en la atmósfera	109
4.4.2.	Concentración de CH ₄ en la atmósfera	111
4.4.3.	Concentración de N ₂ O en la atmósfera	114
4.4.4.	Halocarbonos	116
4.4.5.	Clorofluorocarbonos (CFCs)	117

4.4.6. Hidroclorofluorocarbonos (HCFCs)	120
4.4.7. Hidrofluorocarbonos (HFCs)	123
4.4.8. Perfluorocarbonos (PFCs)	126
4.4.9. Clorocarbonos	129
4.4.10. Halones	132
4.5. Eficiencia Radiativa	133
4.5.1. Eficiencia radiativa efectiva	134
4.6. Cálculo del ERF	135
Bibliografía	140
5. Conclusiones	149

Resumen

En el presente trabajo de tesis, se plantea la utilización de ecuaciones diferenciales ordinarias para modelar el calentamiento global a partir de datos observacionales relacionados con las emisiones y concentraciones de los principales gases de efecto invernadero. En este modelo se tienen en cuenta las dos principales fuentes de emisiones: las fuentes fósiles y el cambio de uso de suelos. Además de considerar los principales gases, nuestro análisis incluye también los gases halogenados. Para realizar los ajustes a los datos reportados, se desarrolló un algoritmo genético. La combinación de las EDOs con el algoritmo genético resulta satisfactoria a la hora de modelar las series de tiempo reportadas. Esta combinación además de replicar el comportamiento de los datos, funciona para reproducir los resultados de trabajos previos que estiman el cambio en el balance energético de la Tierra.

Palabras clave: calentamiento global, modelado matemático, algoritmos genéticos, gases de efecto invernadero, gases halogenados.

Abstract

This thesis puts forth the utilization of ordinary differential equations as a modeling approach for global warming, drawing upon observational data concerning emissions and concentrations of the primary greenhouse gases. This model accounts for the two primary sources of emissions: fossil fuels and land use change. In addition to the primary gases, our analysis also encompasses halogenated gases. To fit the reported data, a genetic algorithm was developed. The combination of EDOs with the genetic algorithm has proven to be an effective modeling approach for the time series in question. This combination successfully replicates the behavior of the data and produces results that align with those of previous studies estimating the change in the Earth's energy balance.

Keywords: global warming, mathematical modelling, genetic algorithms, greenhouse gases, halogenated gases.

Capítulo 1

Introducción

La Tierra se formó hace aproximadamente 4568 millones de años [1]. Comprender la magnitud de este tiempo puede resultar abrumador, así que, para facilitar la visualización, vamos a comprimir esos 4568 millones de años en un solo año calendario (365 días). En esta escala, la forma de vida más antigua que se ha descubierto, que data de hace ~ 3465 millones de años [2], correspondería al 29 de marzo en nuestro calendario. Durante casi tres meses, la Tierra fue un planeta hostil a la vida, similar a lo que pasa en Marte o Venus. Avancemos en el tiempo: los primeros dinosaurios aparecieron hace aproximadamente 231 millones de años [3], lo que correspondería al 13 de diciembre al mediodía. Sin embargo, su reinado llegó a un abrupto final cuando un meteorito impactó nuestro planeta el 26 de diciembre.

Los primeros homínidos aparecieron en un periodo comprendido entre 7 y 4.4 millones de años atrás [4]. En nuestro calendario anual, esto equivaldría a algún momento entre las 10:30 y las 15:50 horas del 31 de diciembre. En comparación, la Revolución Industrial, que comenzó alrededor de 1760, habría tenido lugar aproximadamente a las 23:59:58.46 del mismo día. El albor de nuestra sociedad como la conocemos comenzó hace menos de dos segundos, y ya tenemos un grave problema, el calentamiento global. Sería una terrible coincidencia que esto ocurra en este preciso momento de nuestra existencia. Pero a su vez, que este problema surja a la par cuando tuvimos un desarrollo industrial, es sospechoso.

1.1. Calentamiento global ¿mito o realidad?

El calentamiento global, el cambio climático, las olas de calor y las inundaciones son temas habituales en las noticias, en Internet y en las redes sociales. Décadas de investigación han permitido llegar a una conclusión contundente: **La Tierra se está calentando**. Sin embargo, con el auge de internet, la cantidad de información disponible puede resultar abrumadora, lo que dificulta saber a quién creer. Por un lado, la comunidad científica afirma que el calentamiento global es culpa nuestra y, por otra parte, está cobrando fuerza el movimiento de los negacionistas, que creen que todo es un engaño.

Tomando este conflicto como punto de partida, resulta de suma importancia determinar si el calentamiento global es una mentira bien orquestada o si, por el contrario, cuenta con bases tan sólidas como la teoría de la relatividad o la teoría de la evolución. Por lo tanto, el objetivo principal es explicar el funcionamiento del clima en la Tierra de una forma accesible para tener una mejor comprensión del tema. Si al final llegas a la conclusión de que la situación es un engaño, o por el contrario, que la humanidad se dirige hacia un escenario indeseable, lo hagas bien informado y no te bases únicamente en una convicción ciega.

Para lograrlo, vamos a elaborar una serie de preguntas que, como una escalera, nos acerquen a la respuesta de la pregunta que da nombre al capítulo. Como en cualquier escalera, eres libre de bajar por completo o de sentarte en un escalón a reflexionar antes de continuar. Una vez dicho esto, comencemos subiendo el primer escalón: **¿Se está calentando la Tierra?**

1.2. La temperatura global a finales del siglo XIX

En todo el mundo se están llevando a cabo múltiples esfuerzos para medir los cambios de temperatura en la superficie del planeta a lo largo de varias décadas, y todos ellos coinciden en lo mismo: la temperatura aumenta. No obstante, hay que hacer un paréntesis, ya que, si bien hablamos de la temperatura global, existen eventos aislados, como nevadas en lugares donde no suele nevar o inviernos más crudos en ciertas ciudades. A menudo se utilizan estos

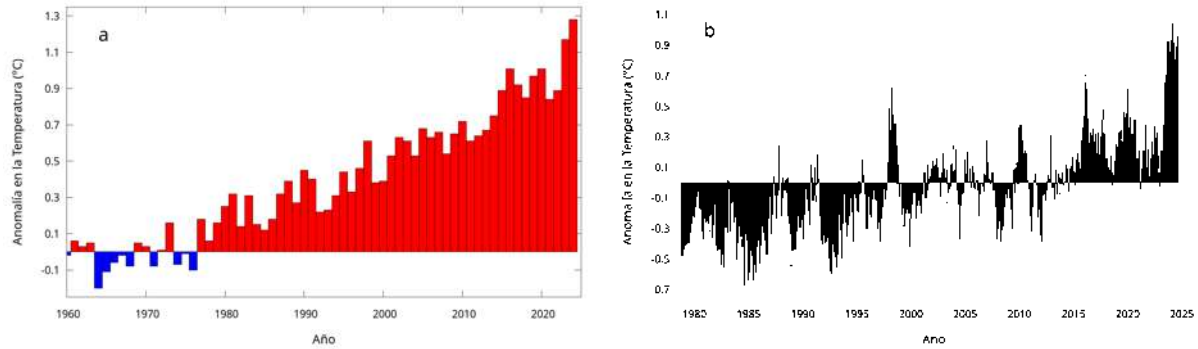


Figura 1.1: Mediciones asociadas al calentamiento global. A la izquierda, la subfigura 1.1a muestra la anomalía de la temperatura global respecto al promedio de 1951-1980 con datos del programa GISTEMP ([5], [6].) La subfigura 1.1b presenta las anomalías de temperatura registradas por satélite UAH, con respecto al promedio de 1991-2020 https://www.nsstc.uah.edu/data/msu/v6.0/tlt/uahncdc_lt_6.0.txt.

eventos para desacreditar el calentamiento global. Lo que no se menciona es que, mientras en Chicago hace más frío de lo habitual, en Mumbai hace más calor de lo normal; son efectos aislados que se anulan en una escala global.

Lo que sí podemos observar es que, independientemente del lugar en el que nos encontremos, la temperatura ha ido en aumento. El Instituto Goddard de Estudios Espaciales (GISS, por sus siglas en inglés) recopila información de estaciones meteorológicas de todo el mundo y publica informes sobre las anomalías globales de temperatura. La Figura 1.1a muestra estos cambios.

Las mediciones en tierra se complementan con el uso de satélites, la Figura 1.1b concentra los datos reportados por el satélite de la Universidad de Alabama ubicada en la ciudad de Huntsville (UAH por sus siglas en inglés), donde la tendencia es la misma, la temperatura sigue aumentando. Una comparación visual evidencia que las mediciones reportadas por satélite no se corresponden del todo con las de la superficie. Esto se explica por la definición de «anomalía de la temperatura», que no es más que el cambio positivo o negativo de una temperatura con respecto a un valor de referencia. Mientras que los datos medidos en la superficie tienen como referencia la temperatura media entre los años 1951 y 1980, los datos reportados por satélite tienen como referencia la temperatura media entre los años 1991 y 2020.

Si el valor de referencia es elevado, la gran mayoría de los datos se situarán por debajo; por el contrario, si el valor de referencia es pequeño, los datos se situarán por encima. En definitiva, se trata de ver el problema desde dos perspectivas: o bien los años pasados han sido más fríos, o los años más recientes han sido más cálidos.

Al observar el comportamiento de los datos mostrados en la Figura 1.1, podemos responder a la pregunta del primer escalón: efectivamente, la temperatura de la Tierra está aumentando, y además las mediciones terrestres y satelitales coinciden en que el incremento es de 1 °C. De este modo, hemos subido al primer peldaño de nuestra escalera y podemos ver la pregunta del segundo escalón, que surge de manera natural: **¿por qué se está calentando la Tierra?**

1.3. El clima de la Tierra, su causa

A lo largo del día, el Sol, además de proporcionar luz, libera calor que la Tierra absorbe y con el que se calienta, mientras que por la noche devuelve una parte de este calor al espacio exterior, lo que provoca un enfriamiento. Los gases de efecto invernadero, presentes en el aire de la atmósfera, son los que conservan una parte del calor absorbido. Los principales gases son el vapor de agua (H_2O), el dióxido de carbono (CO_2), el metano (CH_4) y el óxido nitroso (N_2O). Estas moléculas tienen la capacidad de transmitir el calor procedente del Sol, pero no permiten que todo el calor procedente de la Tierra sea devuelto al espacio. Podemos pensar en ellos como agentes aduaneros que impiden la salida de todo el calor. El fenómeno que acabamos de describir se conoce como **efecto invernadero**. La Figura 1.2 representa de manera ilustrativa este fenómeno.

Es importante mencionar que el efecto invernadero por sí mismo no es el problema, ya que sin él no habría vida en la Tierra y el planeta sería una bola de hielo flotando en el espacio. Si nos detenemos a pensar en el efecto invernadero, solo hay dos maneras de que haya más calor: o bien el Sol o algo en el espacio exterior provoca que la Tierra reciba más calor, o bien la concentración de gases de efecto invernadero va en aumento, lo que haría que se retuviera más calor y con ello un incremento en la temperatura. Antes de analizar las dos



Figura 1.2: Representación del efecto invernadero, donde los gases dejan pasar el calor del Sol (líneas amarillas), pero no permiten que todo el calor escape del planeta (líneas rojas).

opciones, podemos descartar la participación del aire que respiramos, ya que está compuesto aproximadamente en un 79% de N_2 , por lo que, si este gas retuviera calor, ya estaríamos cocinados.

Estando en el segundo escalón de nuestra escalera ahora ya sabemos que la Tierra se está calentando debido a que algo está exacerbando al efecto invernadero, así que la pregunta del tercer peldaño es **¿Qué está perturbando al efecto invernadero?** Nuestro tercer peldaño nos ofrece una bifurcación con dos puertas, por la puerta de la izquierda se encuentra el camino de la concentración de los gases de efecto invernadero, por la puerta derecha mirar hacia el espacio exterior. Vamos a abrir la puerta de la derecha, tal vez tenga razón la frase al final de la intro de los Expedientes Secretos X: «La verdad está ahí fuera».

Si por el contrario quieres tomar el camino de la izquierda puedes pasar directamente a la Sección 1.5. Al final es una escalera, puedes bajar y ver que había a la derecha. No hay puertas cerradas.

1.4. El clima terrestre y el espacio exterior

El efecto invernadero se origina en el Sol. Sin su radiación, la superficie terrestre se congelaría y no existiría la vida tal y como la conocemos. Por lo tanto, es plausible que si se producen cambios en su comportamiento, se modifique la cantidad de energía emitida y se altere el clima de la Tierra. Por otra parte, la Tierra gira alrededor del Sol en una elipse, por lo que su posición varía a lo largo del año, orbitando más cerca o más lejos de él. ¿Y qué hay de su inclinación y rotación? Podríamos tener la mala suerte de que todo jugara en nuestra contra. Analicemos todo lo anterior y tengamos en cuenta estos efectos en el calentamiento global. Subamos el primer escalón, **¿es el Sol causante del calentamiento global?**

1.4.1. El Sol

La energía que recibe la Tierra por unidad de área en forma de radiación electromagnética proveniente del Sol se conoce como irradiancia total solar (TSI, por sus siglas en inglés). A una distancia de 1 UA ¹ (unidad astronómica), la TSI tiene un valor de 1366 W/m² [7] o de ≈ 1361 W/m² [8], dependiendo de la fuente consultada. El Sol se mantiene en constante actividad y, cada 11 años, el campo magnético cambia [9], es decir, los polos norte y sur cambian de lugar. A mitad de este periodo, el Sol entra en un periodo de mayor actividad, conocido como máximo solar, que va disminuyendo hasta el mínimo solar, y el proceso se repite.

Mediante la realización de mediciones de los cambios en el campo magnético solar, se pueden deducir los cambios en la TSI y, a partir de ello, conocer cómo han sido los ciclos solares en el pasado. El modelo SATIRE-S (acrónimo de *Spectral And Total Irradiance REconstructions*), donde la S final indica la versión moderna de este modelo que utiliza la metodología mencionada, proporciona datos desde 1974, que se muestran en la Figura 1.3.

A partir de los datos de SATIRE-S, podemos observar el ciclo solar de 11 años y su pico en el máximo, pero no hay un incremento en el valor de TSI que nos permita concluir que la actividad solar está en aumento. Sería como poner tu taza de café en el microondas durante

¹Distancia promedio de la Tierra con el Sol (149,597,890 km).

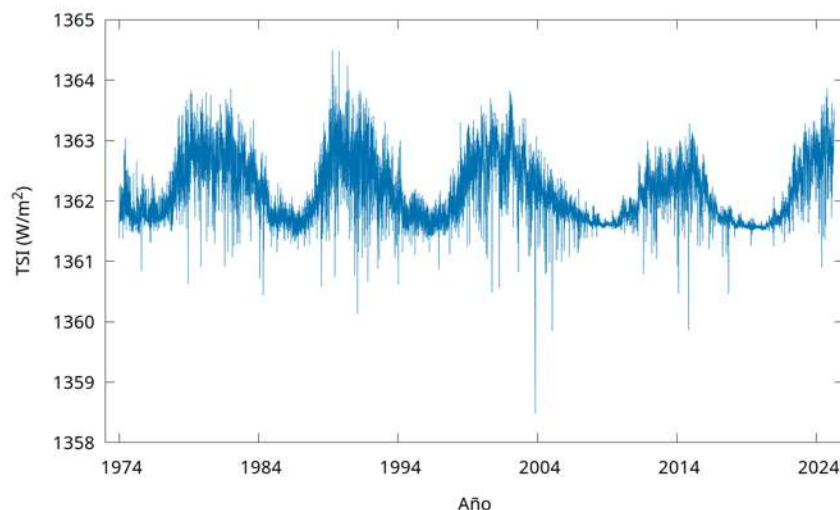


Figura 1.3: TSI medida en vatios por metro cuadrado desde 1974. Datos obtenidos de SATIRE-S, los datos pueden consultarse en el siguiente enlace https://www2.mps.mpg.de/projects/sun-climate/data/SATIRE/SATIRE-S/SATIRE-S_TSI_latest.txt.

unos segundos y después sacarla y dejarla reposar unos minutos; el efecto a largo plazo es imperceptible.

Probablemente te hayas preguntado cómo podemos saber la actividad solar anterior a 1974. Es una pregunta excelente. Lo que debemos hacer es buscar pruebas de manera indirecta. La mayoría de lo que ocurre en el planeta deja una huella: los dinosaurios dejaron fósiles, los meteoritos que impactaron dejaron un cráter, solo hay que saber dónde buscar. En nuestro caso, nos centraremos en los árboles.

Además de la energía solar, llegan otras formas de energía desde el espacio exterior, como los rayos cósmicos, que son partículas subatómicas muy energéticas que viajan casi a la velocidad de la luz.¹¹ La mayoría de estos rayos son desviados por el campo magnético de la Tierra, pero algunos pueden atravesar la atmósfera y entrar en contacto con lo que se cruce en su camino. Si uno de estos rayos colisiona con un átomo de nitrógeno en la atmósfera (^{14}N), este se convierte en un átomo de carbono-14 (^{14}C) [10].

El campo magnético no es el único que desvía los rayos cósmicos, también lo hacen los rayos solares. Por tanto, si el Sol emite más energía, entrarán menos rayos cósmicos en la atmósfera, lo que reducirá la producción de ^{14}C . Las plantas absorben estos átomos de

¹¹299792 km/h.

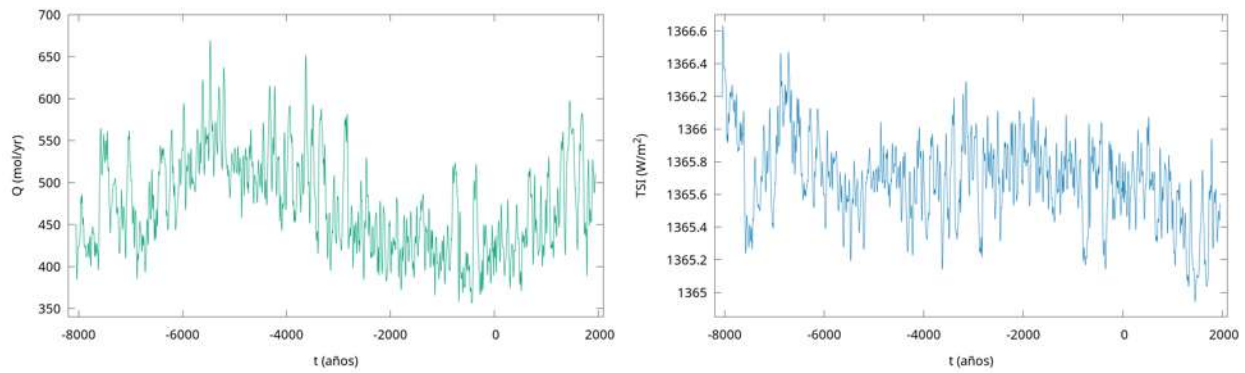


Figura 1.4: Reconstrucciones de radiocarbono. A la izquierda, producción de ^{14}C en moles por año. A la derecha, el cambio en la TSI. Nótese que el año cero se corresponde con el nacimiento de Jesucristo y que los años negativos corresponden al periodo anterior a Cristo.

carbono mediante la fotosíntesis, por lo que volvemos a los árboles. Al medir la cantidad de ^{14}C en sus anillos, podemos saber cuán intensa fue la actividad solar ese año.

Dado que el ^{14}C es un isótopo radiactivo con una vida media de 5700 ± 30 años, es útil para datar especímenes que se formaron en los últimos 55 000 años [11]. Esta técnica, conocida como datación por radiocarbono, se utiliza junto con modelos matemáticos para conocer la producción de ^{14}C en los últimos 10 000 años, lo que permite inferir los cambios en la TSI en ese mismo período [12]. Los resultados de este estudio se observan en la Figura 1.4.

Al reconstruir los datos mediante radiocarbono, se observa que, si bien la producción de ^{14}C presenta oscilaciones, estas abarcan miles de años y no se aprecia una disminución marcada en tiempos recientes que pueda explicar el incremento actual de la temperatura. Esto se corrobora con la TSI, ya que no se observa ningún cambio en su comportamiento, lo que descarta al Sol como causante del calentamiento global.

Subamos al siguiente peldaño: si el Sol no es el causante directo, tal vez algo dentro del sistema solar esté provocando el incremento de la temperatura. **¿Qué puede afectar al clima terrestre dentro del sistema solar?**

1.4.2. Ciclos de Milanković

Descartado el Sol como causante del calentamiento global, nos centraremos en la Tierra y en sus movimientos alrededor de él. Estos movimientos se ven influenciados por los gigantes gaseosos Júpiter y Saturno, cuya influencia gravitatoria altera la órbita terrestre. La órbita terrestre varía de casi circular a elíptica, lo que cambia la radiación solar recibida; a esto se le llama excentricidad. Por otra parte, el grado de inclinación de la Tierra cambia, lo que hace que las estaciones sean más extremas cuanto mayor es el grado de inclinación; este fenómeno se denomina oblicuidad. Por último, la dirección del eje de rotación con respecto a la estrella polar es la precesión de los equinoccios. Estos tres movimientos constituyen los ciclos de Milanković.^{III}

Excentricidad de la órbita

La órbita de la Tierra es una elipse, por lo que, dependiendo de la época del año, se encuentra más o menos alejada del Sol. El punto en el que la Tierra está más cerca del Sol se llama perihelio, y el punto más lejano, afelio. Sin embargo, esto no afecta al calentamiento global, ya que el perihelio se produce en los primeros días de enero (invierno en el hemisferio norte) y el afelio se alcanza en los primeros días de julio. La Figura 1.5 muestra gráficamente el perihelio y el afelio.

La excentricidad varía en ciclos de 100 000 años, con variaciones mayores cada 400 000 años [13]; estos ciclos pueden observarse en la Figura 1.6. Cuando la órbita se encuentra en su punto más elíptico, el planeta recibe un 23 % más de radiación en el perihelio [14]. Actualmente, el valor de la excentricidad es de aproximadamente 0,0167 [15], lo que se acerca a una órbita más circular, correspondiente al ciclo de 100 000 años.

Oblicuidad

Dejando a un lado el efecto de la excentricidad, veamos qué sucede con el ángulo de inclinación o oblicuidad. La oblicuidad se define como el ángulo de inclinación del ecuador

^{III}Milutin Milanković (1879-1958) matemático serbio que propuso que las eras de hielo eran causadas por variaciones orbitales de la Tierra.

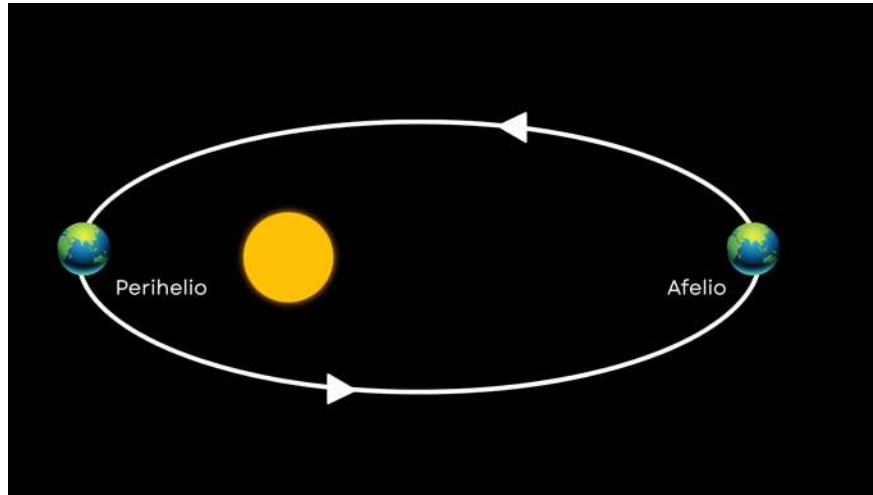


Figura 1.5: Bosquejo de la órbita de la Tierra alrededor del Sol, entre el perihelio y el afelio hay una diferencia de 3 % de distancia (alrededor de 5 millones de km.)

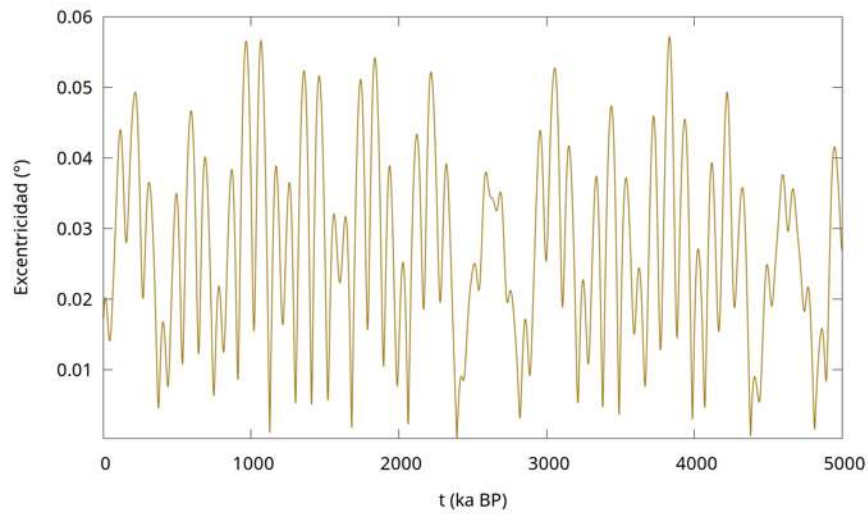


Figura 1.6: Excentricidad de la órbita de la Tierra a lo largo del tiempo. El tiempo se encuentra en ka BP (*Before Present*), donde el año cero se corresponde con el año 1950. Por otra parte ka se refiere a kiloaños (milenios) por lo que el gráfico se extiende hasta cinco millones de años en el pasado. Los datos provienen de [16].

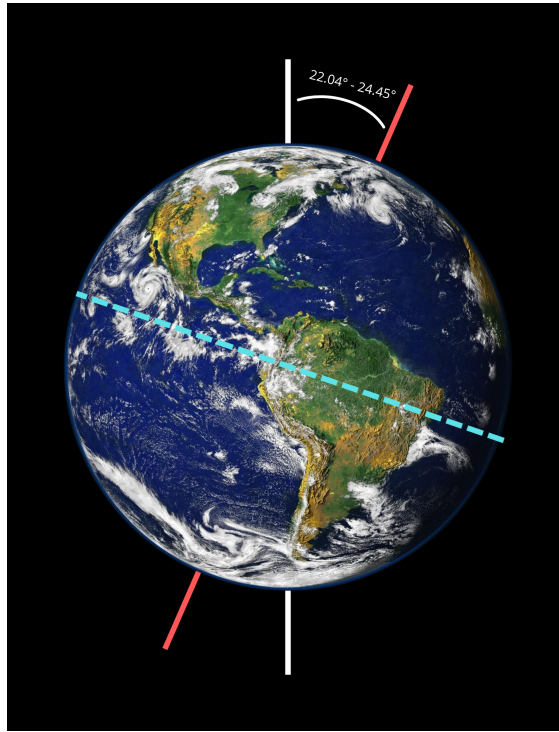


Figura 1.7: Oblicuidad de la Tierra, donde la línea blanca es la perpendicular con respecto a la eclíptica, mientras que la línea roja marca el ángulo de inclinación, finalmente la línea punteada representa al ecuador.

terrestre respecto a la eclíptica,^{iv} tal y como se muestra en la Figura 1.7. En la actualidad, este ángulo es de $23,45^\circ$ [17], un valor intermedio entre los extremos de $22,1^\circ$ y $24,5^\circ$ que se alcanzan en un ciclo de 41 000 años [18].

En los últimos quinientos mil años, el ángulo de inclinación ha variado entre los valores mencionados anteriormente, como se observa en la Figura 1.8. Cuanto mayor sea la inclinación, más extremas serán las estaciones, ya que cada hemisferio recibe más energía. El ángulo actual se encuentra relativamente en el centro del rango de variación y seguirá disminuyendo como parte del ciclo natural, lo que conllevará veranos más fríos y, eventualmente, una nueva era de hielo.

Precesión de los equinoccios

El último de los ciclos de Milanković es la precesión, que consiste en el movimiento del eje de rotación de la Tierra alrededor de la línea perpendicular a la eclíptica, similar al mo-

^{iv}La eclíptica es el plano de la Tierra alrededor del Sol.

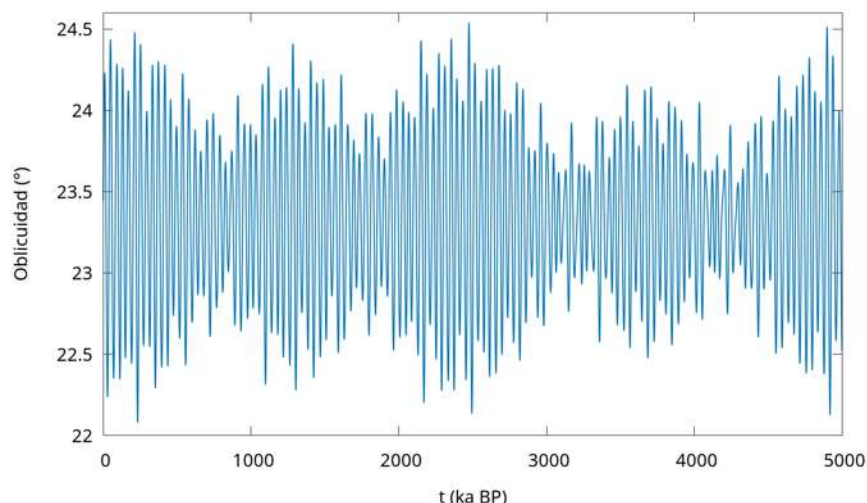


Figura 1.8: Cambio en la oblicuidad de la Tierra. El tiempo se encuentra en ka BP (*Before Present*), donde el año cero se corresponde con el año 1950. Por otra parte ka se refiere a kiloaños (milenarios). Los datos provienen de [16].

vimiento de una peonza o un trompo antes de caer. Este movimiento se debe a que la Tierra no es una esfera perfecta, ya que está achatada en los polos, además de ser afectada por las fuerzas gravitatorias del Sol y la Luna. Este movimiento, que dura aproximadamente 26 000 años, provoca un desplazamiento gradual de los equinoccios (precesión de los equinoccios), lo que altera la posición relativa de las estrellas en el cielo y modifica qué constelaciones son visibles en cada época del año. Además, influye en la cantidad de energía recibida en las estaciones, lo que afecta el clima en el largo plazo.

En conjunción con la precesión se halla la nutación, que es un vaivén que se superpone a la precesión. La nutación provoca una ondulación cada aproximadamente 18 años, por lo que se superponen más de 1300 ondulaciones por cada ciclo de precesión. En la Figura 1.9 se muestran estos dos movimientos. La nutación es la razón por la que la oblicuidad de la Tierra varía con el tiempo. Hoy día la estrella polar es Polaris, pero dentro de aproximadamente 14 000 años, la nueva estrella Polar será Vega. Esto puede verse en la Figura 1.10, junto a un plano de constelaciones.

Los ciclos de Milanković no son factores determinantes en el calentamiento global, debido a que sus efectos se manifiestan en escalas temporales de miles de años. Además, estos ciclos están provocando que la Tierra experimente climas más fríos, lo que no permite utilizarlos

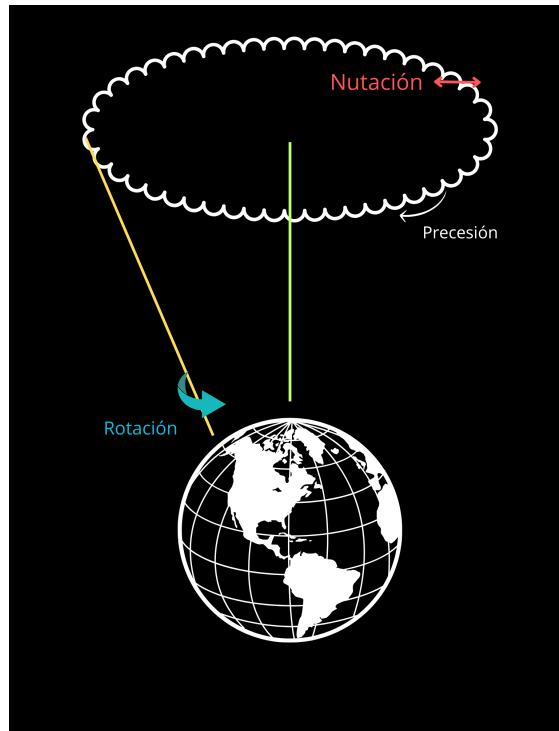


Figura 1.9: Ejemplificación de los movimientos de precesión y nutación de la Tierra.

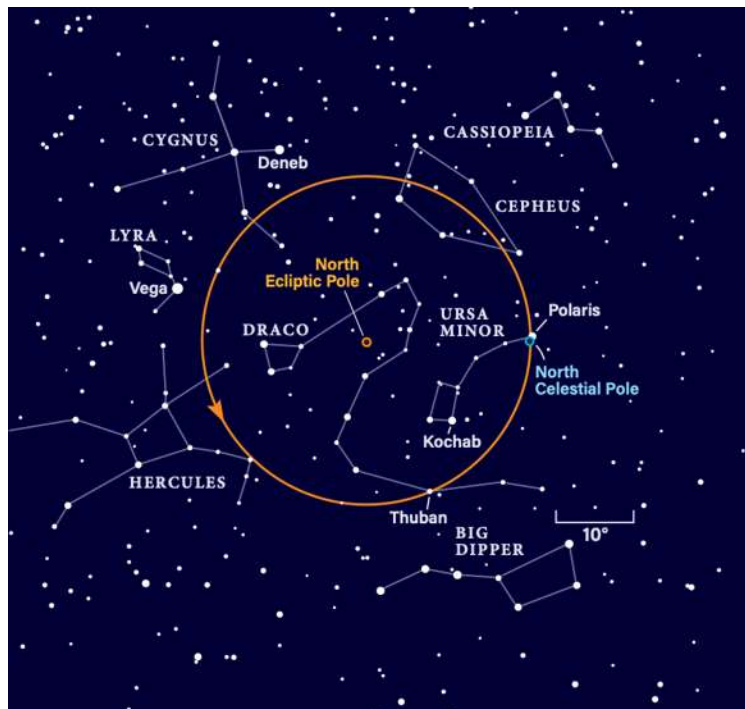


Figura 1.10: Diagrama del plano estelar mostrando la precesión (círculo anaranjado). Polaris es actualmente la estrella del Polo Norte, pero será reemplazada por Vega en el futuro. Créditos: *Astronomy* [19]

como justificación del aumento de la temperatura del planeta. Este camino nos lleva a un callejón sin salida. Solo queda bajar y observar lo que hay detrás de la puerta relacionada con el cambio en la concentración de gases de efecto invernadero.

1.5. Gases de efecto invernadero

Tanto si vienes directamente del apartado correspondiente a la Sección 1.3 como si has llegado hasta aquí tras leer lo que ocurre en el espacio exterior (si no lo has hecho, te recomiendo que lo hagas, ya que es posible que aprendas algo nuevo). La puerta que abriremos es la correspondiente a los gases de efecto invernadero, de aquí los escalones van hacia abajo, contrario de lo que hemos venido haciendo. Sabemos que la temperatura de la Tierra está aumentando debido a un cambio en la concentración de estos gases. Previamente mencionamos los principales gases de efecto invernadero: el vapor de agua, el dióxido de carbono, el metano y el óxido nitroso. Los siguientes apartados (escalones) están dedicados a cada uno de estos gases, empezando por el de mayor importancia: **dióxido de carbono**.

1.5.1. Dióxido de carbono

La concentración de CO₂ actualmente (junio de 2025) es de 430 ppm [20] (partes por millón).^v En contraste, la concentración más alta registrada en los últimos 800 000 años no superó las 300 ppm, como se observa en la Figura 1.11. Para obtener un registro temporal tan amplio, se ha estudiado el aire atrapado en el hielo antártico. Los datos de la Figura 1.11 cuentan la misma historia que la Sección 1.4.2: en los últimos 800 000 años no hay indicios de un calentamiento ni remotamente similar al que estamos viviendo actualmente. Para encontrar un periodo en el pasado en el que la concentración de CO₂ fuese similar a la actual, debemos remontarnos 3 millones de años, al Plioceno medio, cuando la concentración de CO₂ rondaba las 400 ppm [21].

La pregunta crucial es: **¿Cómo podemos estar seguros de que este incremento se**

^vEs una unidad de concentración que representa la cantidad de un compuesto presente por cada millón de unidades de solución. Es un concepto similar al porcentaje, solo que en lugar de usar una base de cien, se utiliza una base de un millón.

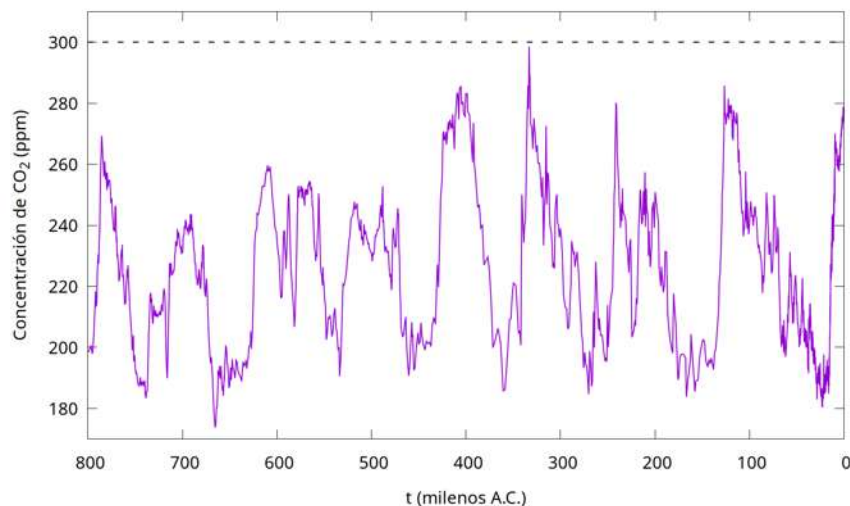


Figura 1.11: Concentración de CO₂ a lo largo del tiempo, la línea punteada marca el límite de 300 ppm que no fue superado en el lapso de los 800 000 años que abarcan los datos reportados. Los datos provienen de [22].

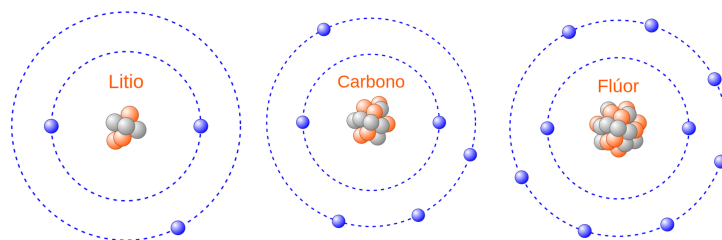


Figura 1.12: Representación de elementos neutros (con igual número de protones y electrones). Las esferas rojas representan los protones, las esferas grises, los neutrones y los electrones orbitan alrededor del núcleo.

debe a la acción humana? Para responder a esta interrogante, recurriremos al carbono como átomo y a sus isótopos. Los átomos están conformados por un núcleo y una nube de electrones (de carga negativa) que lo rodea. El núcleo, a su vez, se compone de: protones (partículas con carga positiva) y neutrones (partículas sin carga, neutras). La cantidad de protones determina el elemento químico, por ejemplo: 3 protones corresponden al litio (Li), 6 protones son el carbono (C), mientras que 9 protones dan lugar a flúor (F) como se puede ver en la Figura 1.12. En condiciones normales, el núcleo de un elemento tiene una cantidad igual de neutrones y protones. Por otro lado, la cantidad de electrones que orbitan alrededor del núcleo pueden variar, lo que altera la carga del átomo y da lugar a la formación de iones.

Ahora bien, los isótopos son átomos de un mismo elemento, pero con distinto número

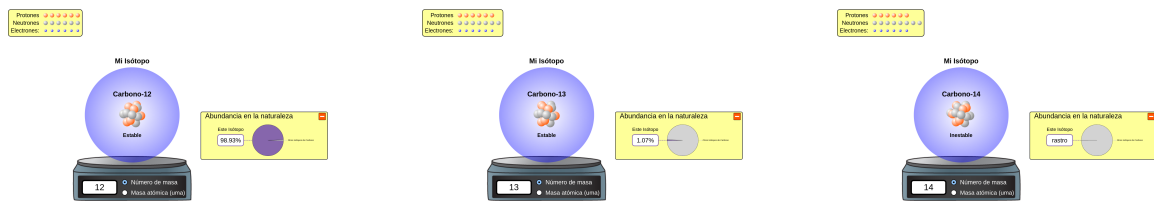


Figura 1.13: Isótopos de carbono y su abundancia en la naturaleza, donde las esferas rojas representan los protones, las esferas grises los neutrones y los electrones se encuentran en forma de «nube» alrededor del núcleo. Las figuras de los isótopos, así como las de los átomos (véase la Figura 1.12), fueron creadas usando los simuladores de la Universidad de Colorado en Boulder. Puedes hacer lo mismo y encontrar otros simuladores de áreas como la física, las matemáticas y la biología en el siguiente enlace: <https://phet.colorado.edu/es/>.

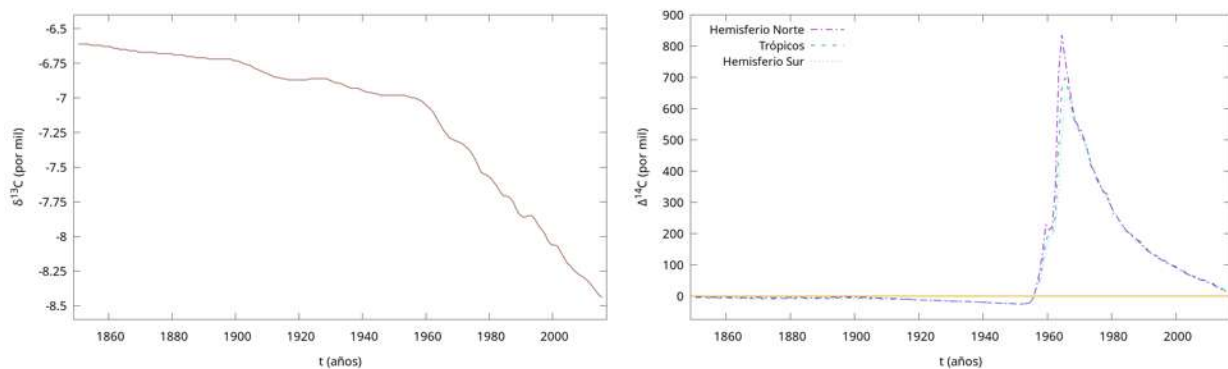


Figura 1.14: Cambios en las relaciones $\delta^{13}\text{C}$ (izquierda) y $\Delta^{14}\text{C}$ (derecha) a lo largo del tiempo. Los datos provienen de [23]. Los valores de $\Delta^{14}\text{C}$ se reportan para tres zonas: Hemisferio Norte (30-90°N), los Trópicos (30°S a 30°N) y el Hemisferio Sur (30-90°S). Los datos de $\delta^{13}\text{C}$ son promedios globales.

de neutrones. Esto no afecta a sus propiedades químicas, pero sí a las físicas, ya que su masa cambia. Esto es relevante, ya que los procesos naturales tienden a llevarse a cabo de mejor manera con ciertos isótopos. El carbono posee tres isótopos: ^{12}C , ^{13}C y ^{14}C . Una representación de estos isótopos se observa en la Figura 1.13. Mientras que el ^{12}C y ^{13}C son isótopos estables, el ^{14}C es radiactivo, por lo que es importante tenerlo en cuenta.

De la Figura 1.13 se extraen las proporciones de los tres isótopos en la Tierra, siendo el ^{12}C el más abundante. Desde la Revolución Industrial, se han producido cambios en la proporción de estos isótopos. Las variaciones del isótopo ^{13}C se expresan como $\delta^{13}\text{C}$ y miden las desviaciones en la relación $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$. En el caso del ^{14}C , la nomenclatura es $\Delta^{14}\text{C}$ y mide los cambios en la relación carbono $^{14}\text{C}/^{12}\text{C}$. Estos cambios se muestran en la Figura 1.14 a partir del año 1850.

El comportamiento de las relaciones $\delta^{13}\text{C}$ y $\Delta^{14}\text{C}$ va decayendo, ya que estas dos relaciones miden el cambio respecto al ^{12}C , por lo que, si la concentración de los otros dos isótopos disminuye, es debido a que estos se diluyen al haber una adición continua de ^{12}C . La inyección de ^{12}C debe provenir de una fuente con muy poca cantidad o carente de los demás isótopos, ya que el ^{13}C no es el preferido en procesos que ocurren en la naturaleza, como lo es la fotosíntesis. En el caso del ^{14}C , al ser un elemento radiactivo, la fuente de este nuevo carbono debe ser lo suficientemente antigua como para no contener nada de este isótopo. Por lo tanto, nos preguntamos: **¿cuál es esta nueva fuente de carbono?**

Antes de responder a esta pregunta, es necesario hacer un paréntesis relacionado con el pico de concentración de ^{14}C alrededor de los años 60. Durante esta década se llevaron a cabo diversos ensayos nucleares en los que los neutrones producidos por las bombas de hidrógeno reaccionaron con el nitrógeno atmosférico para dar lugar a ^{14}C . Este efecto se denomina «efecto de bomba atómica» [24]. Como resultado de estas pruebas nucleares, la producción de ^{14}C superó a la producción natural en dos órdenes de magnitud [25]. Las pruebas nucleares fueron prohibidas con la firma del Tratado de Prohibición de Ensayos Nucleares, lo que redujo la producción de ^{14}C «nuclear» [26].

El petróleo, el carbón y el gas natural se originan a partir de restos de vegetación y animales que vivieron en épocas geológicas pretéritas, caracterizadas por una ausencia de ^{14}C y una presencia limitada de ^{13}C . Estos elementos han sido utilizados desde la Revolución Industrial para propiciar el desarrollo de nuestra civilización, lo que ha resultado en una disminución de la concentración de los isótopos de carbono más pesados. Este fenómeno, denominado **Efecto Suess** [27], fue descubierto por Hans Suess,^{vi} a mediados de la década de 1950.

Una vez alcanzado este punto, podemos concluir que el fenómeno del calentamiento global no se trata de un proceso natural, ni tampoco una consecuencia derivada de cambios dentro del Sistema Solar. El origen de este fenómeno es inequívocamente de origen antropogénico, que dió inicio con la Revolución Industrial y la consiguiente emisión de CO_2 como resultado

^{vi}Hans Suess (1909-1993) químico austriaco pionero en las dataciones basadas en el ^{14}C en los anillos de los árboles.

de la quema de combustibles fósiles. La evidencia es concluyente en este sentido, lo que lleva a una respuesta afirmativa a la pregunta inicial: **el fenómeno del calentamiento global es una realidad** y los seres humanos somos los principales responsables de este fenómeno.

Continuando con el resto de gases de efecto invernadero (GHG,^{vii} por sus siglas en inglés; en adelante GHG) que contribuye al calentamiento global. Por tanto, el análisis del CO₂ no representa el peldaño final. Es necesario continuar descendiendo por los restantes escalones de nuestra «escalera conceptual» para comprender de una manera integral la magnitud del calentamiento global.

1.5.2. Vapor de agua

El vapor de agua es el mayor contribuyente al calentamiento global, siendo esta contribución del doble o el triple a la del CO₂ [28]. La concentración de vapor de agua en la atmósfera cambia con la temperatura, a diferencia del resto de gases de efecto invernadero, que cambian principalmente por las emisiones. El aire caliente retiene más vapor de agua, lo que lo hace más húmedo, aproximadamente un 7 % más por cada grado Celsius (°C) [29]. A más temperatura, más vapor de agua y más calor. A medida que aumenta la concentración de otros gases, también lo hace la temperatura, lo que aumenta el vapor de agua y la temperatura de forma indirecta, en un ciclo de retroalimentación [30]. Es por lo anterior que el aumento de la temperatura por el vapor de agua no se considera causado por el ser humano.

1.5.3. Metano

El siguiente escalón es el correspondiente al CH₄, el segundo gas de efecto invernadero más importante. Su concentración actual (agosto de 2025) es de 1930 ppb [31] (partes por billón).^{viii} Este nivel de concentración es aproximadamente 2,5 veces mayor que el medido en los núcleos de hielo antárticos [32]. Este gas no ha estado por encima de las 800 ppb en los últimos 800 milenios (véase Figura 1.15).

^{vii}*Greenhouse Gases*

^{viii}Al igual que las ppm, las ppb se emplean para expresar la cantidad de moléculas de una sustancia por billón de moléculas de solución.

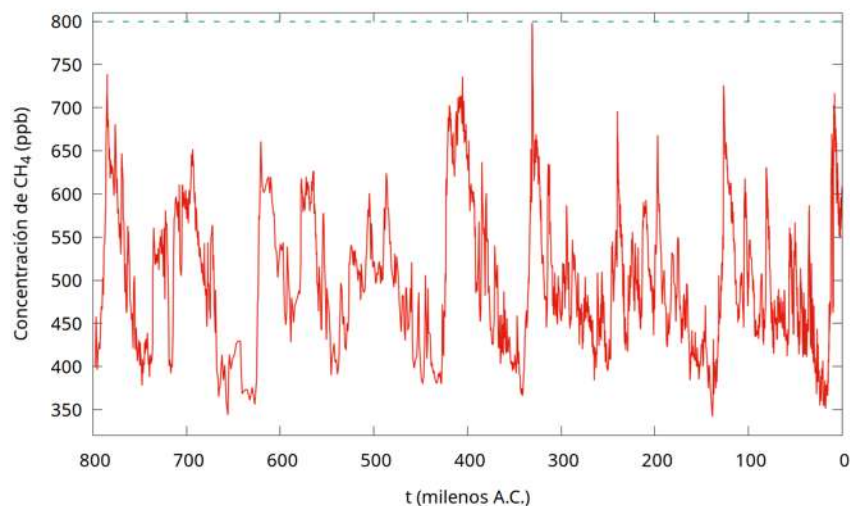


Figura 1.15: Concentración de CH₄ en los últimos 800 000 años. La línea punteada marca las 800 ppb un valor que no fue superado en este lapso de tiempo. Los datos provienen de [32].

El CH₄ es un gas de efecto invernadero más potente que el CO₂; sin embargo, su vida media en la atmósfera es considerablemente menor, con un valor que se encuentra en el rango de $9,7 \pm 1,5$ años [33]. Además de su contribución directa al calentamiento global, el metano ejerce una influencia indirecta sobre el vapor de agua estratosférico [34], lo que se traduce en un incremento adicional de la temperatura. En la década de 2010-2019, se estima que cerca del 65 % de las emisiones globales de metano tienen un origen antropogénico [35]. En el Capítulo 4 se analiza con mayor detalle la contribución de las fuentes de emisión de metano.

El principal mecanismo de remoción del CH₄ en la atmósfera es su oxidación mediante el radical hidroxilo (OH[•]), especie neutra del ion hidroxilo OH⁻. Este radical actúa como un agente de limpieza atmosférica, al ser responsable de la eliminación de diversos gases de efecto invernadero, entre ellos el metano, así como de varios halocarbonos [36]. No obstante, el incremento en la concentración de CH₄ conlleva a una reducción en la disponibilidad del radical hidroxilo, lo que a su vez limita su capacidad para remover halocarbonos, cuyas vidas medias y capacidades de retención de calor son miles de veces superiores a las del CO₂.

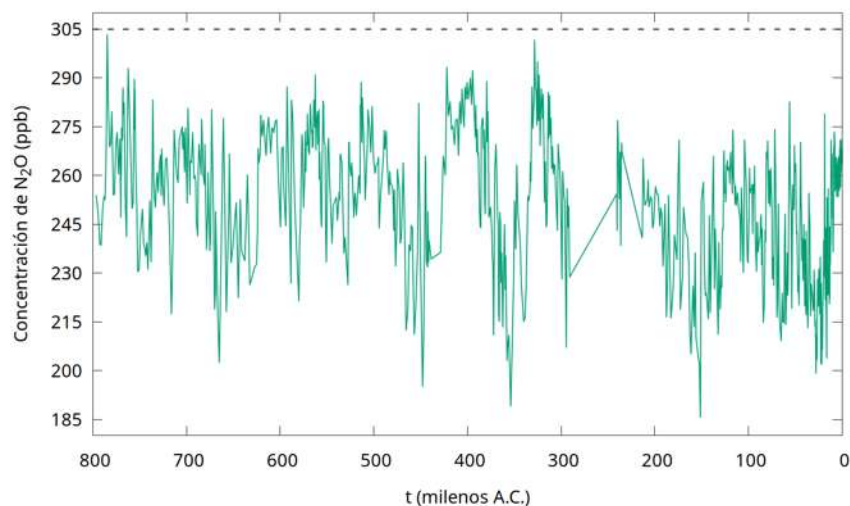


Figura 1.16: Concentración de N_2O en los últimos 800 000 años. La línea punteada marca el límite de 305 ppb que no fue superado en esta ventana de tiempo. Los datos provienen de [37].

1.5.4. Óxido nitroso

El óxido nitroso es el tercer gas de efecto invernadero más importante. Actualmente, su concentración es de 339 ppb [31], un 11 % más alta que el máximo registrado en los núcleos de hielo de la Antártida [37] (véase Figura 1.16). Este crecimiento es menor que el de CO_2 y CH_4 . Las principales causas de la perturbación del ciclo de N_2O son el uso de fertilizantes artificiales, la quema de combustibles fósiles y algunos procesos industriales [38]. La vida media del N_2O es de 120 años [39] y su capacidad de retención de calor es de 265 veces más que el CO_2 [40].

De las emisiones totales de N_2O , el 40 % tienen su origen en fuentes de origen antropogénico [41]. El N_2O es eliminado de la atmósfera principalmente por fotólisis y reacciones de oxidación que producen óxidos de nitrógeno NO_x . Estos compuestos, a su vez, destruyen la capa de ozono [42]. Se proyecta un incremento en las emisiones, atribuible en gran medida al uso de fertilizantes para sostener el crecimiento poblacional [38]. Además del empleo de fertilizantes destinado a la producción alimentaria, se utiliza en los cultivos destinados a la producción de biocombustibles. Esta práctica podría contrarrestar los beneficios esperados de la utilización de biocombustibles [43].

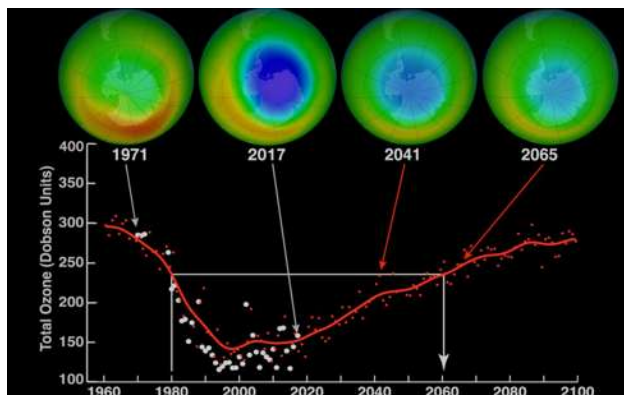


Figura 1.17: Niveles de ozono en la Antártida desde 1960 junto con proyecciones hasta 2100. Se prevee que se recuperen los niveles de ozono previos a 1980 para el año 2075. Imagen perteneciente a la NASA [44].

1.6. Participantes silenciosos

Existe un refrán que reza, «El camino al infierno está empedrado de buenas intenciones», haciendo alusión a que tener buenas ideas sin un conocimiento completo de la situación puede acarrear consecuencias inesperadas. Un ejemplo de lo anterior es el desarrollo de los halocarbonos. Durante la década de 1920, los refrigerantes empleados en los refrigeradores eran tóxicos. Entre ellos se encontraban el amoníaco (NH_3) y el clorometano (CH_3Cl). Ciertas compañías, como General Motors y DuPont, iniciaron el desarrollo de alternativas que no resultasen tóxicas. Esta misión le fue encomendada a Thomas Midgley.^{ix} Midgley dió con una solución, los clorofluorocarbonos (CFCs). Los CFCs son hidrocarburos que se hallan parcial o completamente halogenados. En este sentido, los halógenos empleados son el cloro (Cl), bromo (Br) y flúor.

Los CFCs fueron sintetizados en 1928 como refrigerantes seguros para uso comercial [45]. Debido a su nula toxicidad, los freones (denominación otorgada a los CFC por DuPont), experimentaron un crecimiento exponencial en su producción durante las décadas de 1950 y 1960. Esto provocado por la versatilidad de los CFCs, que además de ser utilizados como refrigerantes, se emplearon como propelentes en sprays, acondicionadores de cabello y otros

^{ix}Thomas Midgley (1889-1944), ingeniero químico norteamericano. Se desempeñó en el desarrollo de la gasolina con plomo y en la formulación de los primeros freones. Midgley falleció en 1944, por asfixia a causa de un mecanismo diseñado por él mismo, el cual estaba destinado a ayudarlo a mover su cuerpo paralizado por la poliomielitis.

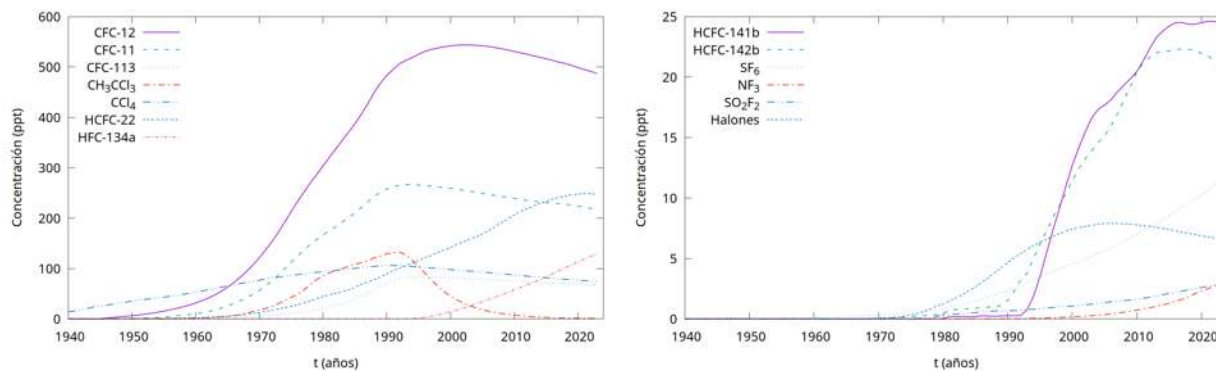


Figura 1.18: Concentración atmosférica de algunos halocarbonos. Los datos provienen de [48]. El grupo Halones comprende al halon-1211, halon-1301 y halon-2402.

productos de belleza. Sin embargo, en 1974, dos químicos de la Universidad de California, Sherwood Rowland y Mario Molina, demostraron que, al descomponerse mediante la radiación UV, los CFCs liberan cloro, un elemento que destruye la capa de ozono [46]. Mediante reacciones en cadena un único átomo de cloro es suficiente para aniquilar 100 000 moléculas de ozono [47].

En 1985, se demostró que el desgaste de la capa de ozono era más intenso con el paso de los años, siendo más pronunciado en la Antártida [49]. Este hallazgo llevó a la firma del Protocolo de Montreal en 1987, un acuerdo internacional que tuvo como objetivo reducir las emisiones de las sustancias que desgastan la capa de ozono, que incluyó además de los CFCs a los halones (compuestos empleados en los extinguidores) que contienen bromo en su estructura. En el año 1990, en Londres, se acordó de manera oficial la eliminación de la producción de CFCs para el año 2000. En el marco de la Enmienda de Londres, además de la prohibición de los CFCs, se fueron añadidos solventes clorados, tales como el metil cloroformo (CH_3CCl_3) y el tetracloruro de carbono (CCl_4). El estricto apego al Protocolo de Montreal ha permitido la recuperación de la capa de ozono. Se prevé que esta recuperará, como se muestra en la Figura 1.17, alcanzando niveles comparables a los registrados a principios de la década de 1960.

La industria ha formulado dos clases de sustitutos para CFCs: los hidroclorofluorocarbonos (HCFC) y los hidrofluorocarbonos (HFC). Los primeros añaden átomos de hidrógeno en su estructura, lo que reduce su vida media, ya que reaccionan con el radical hidroxilo (lo que

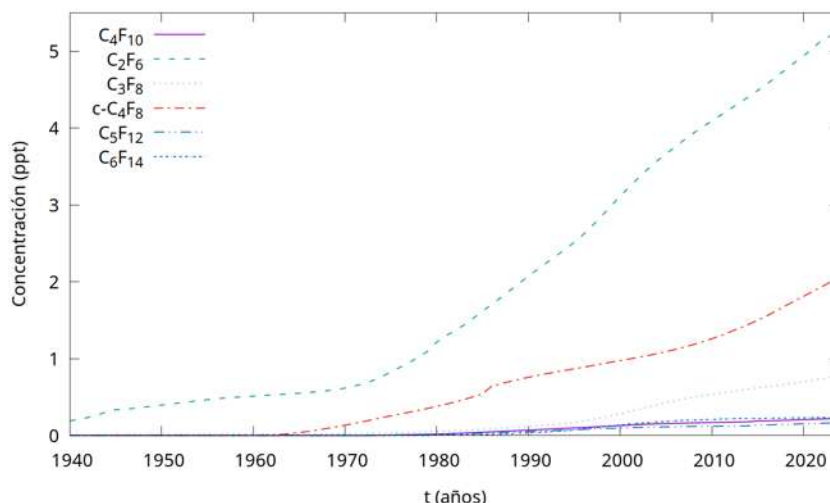


Figura 1.19: Cambios en la concentración atmosférica de algunos PFCs seleccionados. Los datos provienen de [48].

disminuye su disponibilidad para descomponer el CH_4). Sin embargo, siguen teniendo cloro en su estructura, lo que puede ser liberado y desgastar la capa de ozono. Por otra parte, los HFCs carecen de cloro en su estructura química. Sin embargo, algunos de estos compuestos poseen vidas medias que alcanzan casi los 300 años [40] y poseen capacidades de retención de calor que superan en decenas de miles de veces las del CO_2 [50]. Como se evidencia en la Figura 1.18, en años recientes se ha observado un incremento en la concentración de los hidrofluorcarburos (HFC), al tiempo que se ha producido una disminución en la concentración de los CFCs y de los halones.

Finalmente, tenemos el grupo de los perfluorocarbonos (PFCs), que comprenden cadenas de carbonos completamente fluorinadas (CF_4 , C_2F_6 , C_3F_8 , C_4F_{10} ; etc.), otras especies químicas que entran en este grupo son: el trifluoruro de nitrógeno (NF_3), el hexafluoruro de azufre (SF_6) y el fluoruro de sulfirilo (SO_2F_2). Las especies completamente fluorinadas causan cambios climáticos de larga duración, que se extienden a lo largo de milenios [51]. El incremento en las concentraciones de estos elementos, aunque en niveles de partes por trillón (ppt),^x no debe ser subestimado en lo que respecta a su impacto en el calentamiento global [52]. La Figura 1.19 muestra los cambios en la concentración de algunos PFCs, mientras que

^xLas partes por trillón siguen la misma lógica que las ppm y ppb, la cantidad de moléculas presentes por trillón de moléculas de solución. La equivalencia entre las tres medidas de concentración es la siguiente: $1 \text{ ppm} = 1000 \text{ ppb} = 1\,000\,000 \text{ ppt}$.

en la Figura 1.18 se encuentran algunas otras especies flourinadas.

Como se ha expuesto en el presente capítulo, en el fenómeno del calentamiento global participan varios agentes, cuya contribución puede variar. Sin embargo, es importante considerar todos estos factores al realizar un análisis de esta problemática. Con esto hemos llegado al punto final de nuestra escalera conceptual, un ejercicio de divulgación que tiene como objetivo exponer el problema del calentamiento global, desde su origen y causas, de una manera comprensible, pero sin dejar de lado los fundamentos científicos. El capítulo siguiente se abordará la parte matemática, haciendo énfasis en el concepto de **modelo matemático**.

Bibliografía

- [1] Audrey Bouvier y Meenakshi Wadhwa. «The age of the Solar System redefined by the oldest Pb–Pb age of a meteoritic inclusion». En: *Nature Geoscience* 3 (ago. de 2010). DOI: [10.1038/ngeo941](https://doi.org/10.1038/ngeo941).
- [2] J. William Schopf. «Pioneers of Origin of Life Studies—Darwin, Oparin, Haldane, Miller, Oró—And the Oldest Known Records of Life». En: *Life* 14.10 (2024). ISSN: 2075-1729. DOI: [10.3390/life14101345](https://doi.org/10.3390/life14101345).
- [3] Julia Desojo et al. «The Late Triassic Ischigualasto Formation at Cerro Las Lajas (La Rioja, Argentina): fossil tetrapods, high-resolution chronostratigraphy, and faunal correlations». En: *Scientific Reports* (jul. de 2020). DOI: [10.1038/s41598-020-67854-1](https://doi.org/10.1038/s41598-020-67854-1).
- [4] William Harcourt-Smith. «The First Hominins and the Origins of Bipedalism». En: *Evolution Education and Outreach* 3 (abr. de 2010), págs. 333-340. DOI: [10.1007/s12052-010-0257-6](https://doi.org/10.1007/s12052-010-0257-6).
- [5] GISTEMP Team. *GISS Surface Temperature Analysis (GISTEMP), version 4*. NASA Goddard Institute for Space Studies. Dataset accessed 2025-02-20. 2025. URL: <https://data.giss.nasa.gov/gistemp/>.
- [6] N. Lenssen et al. «A GISTEMPv4 observational uncertainty ensemble». En: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 129.17 (2024). DOI: [10.1029/2023JD040179](https://doi.org/10.1029/2023JD040179).
- [7] Judith Lean. «The Sun’s variable radiation and its relevance for Earth». En: *Annu. Rev. Astron. Astrophys* 35 (sep. de 1997), págs. 33-67. DOI: [10.1146/annurev.astro.35.1.33](https://doi.org/10.1146/annurev.astro.35.1.33).
- [8] Greg Kopp y Judith Lean. «A New, Lower Value of Total Solar Irradiance: Evidence and Climate Significance». En: *Geophysical Research Letters* 38 (ene. de 2011). DOI: [10.1029/2010GL045777](https://doi.org/10.1029/2010GL045777).

-
- [9] Claus Fröhlich y Judith Lean. «Solar radiative output and its variability: Evidence and mechanisms». En: *Astronomy and Astrophysics Review* 12 (dic. de 2004), págs. 273-320. DOI: [10.1007/s00159-004-0024-1](https://doi.org/10.1007/s00159-004-0024-1).
- [10] Jürg Beer, Ken McCracken y Rudolf von Steiger. «Production of Cosmogenic Radionuclides in the Atmosphere». En: *Cosmogenic Radionuclides: Theory and Applications in the Terrestrial and Space Environments*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012, págs. 139-177. ISBN: 978-3-642-14651-0. DOI: [10.1007/978-3-642-14651-0_10](https://doi.org/10.1007/978-3-642-14651-0_10).
- [11] Irka Hajdas et al. «Radiocarbon dating». En: *Nature Reviews Methods Primers* 1.1 (2021), pág. 62. ISSN: 2662-8449. DOI: [10.1038/s43586-021-00058-7](https://doi.org/10.1038/s43586-021-00058-7).
- [12] R. Roth y F. Joos. «A reconstruction of radiocarbon production and total solar irradiance from the Holocene ^{14}C and CO_2 records: implications of data and model uncertainties». En: *Climate of the Past* 9.4 (2013), págs. 1879-1909. DOI: [10.5194/cp-9-1879-2013](https://doi.org/10.5194/cp-9-1879-2013).
- [13] Jacques Laskar et al. «La2010: A new orbital solution for the long term motion of the Earth». En: *Astronomy & Astrophysics* 532 (mar. de 2011). DOI: [10.1051/0004-6361/201116836](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201116836).
- [14] NASA Science Editorial Team. *Milankovitch (Orbital) Cycles and Their Role in Earth's Climate*. NASA Science website. 2020. URL: <https://science.nasa.gov/science-research/earth-science/milankovitch-orbital-cycles-and-their-role-in-earths-climate/>.
- [15] John C. H. Chiang y Anthony J. Broccoli. «A role for orbital eccentricity in Earth's seasonal climate». En: *Geoscience Letters* 10.1 (2023), pág. 58. ISSN: 2196-4092. DOI: [10.1186/s40562-023-00313-7](https://doi.org/10.1186/s40562-023-00313-7).
- [16] A Berger y Marie-France Loutre. *Parameters of the Earths orbit for the last 5 Million years in 1 kyr resolution*. dataset. Supplement to: Berger, A; Loutre, M-F (1991):

-
- Insolation values for the climate of the last 10 million of years. *Quaternary Science Reviews*, 10(4), 297-317. 1999. DOI: [10.1594/PANGAEA.56040](https://doi.org/10.1594/PANGAEA.56040).
- [17] H. Pälike. «EARTH | Orbital Variation (Including Milankovitch Cycles)». En: *Encyclopedia of Geology*. Ed. por Richard C. Selley, L. Robin M. Cocks y Ian R. Plimer. Oxford: Elsevier, 2005, págs. 410-421. DOI: <https://doi.org/10.1016/B0-12-369396-9/00123-4>.
- [18] C. J. Campisano. *Milankovitch Cycles, Paleoclimatic Change, and Hominin Evolution*. Ed. por Nature Education. *Nature Education Knowledge*, 4(3):5. 2012. URL: <https://www.nature.com/scitable/knowledge/library/milankovitch-cycles-paleoclimatic-change-and-hominin-68244581/> (visitado 29-12-2025).
- [19] Roen Kelly. *As Earth's axis precesses over 26,000 years, what bright stars become the North Star*. URL: <https://www.astronomy.com/science/earths-axis-precesses-bright-stars-become-the-north-star/> (visitado 25-09-2025).
- [20] Dr. Xin Lan y Dr. Ralph Keeling. *NOAA/GML and Scripps Institution of Oceanography CO₂ and greenhouse gas trends*. <https://gml.noaa.gov/ccgg/trends/> and <https://scrippsco2.ucsd.edu/>. Accessed: 2024-10-20. 2024.
- [21] M.E. Raymo et al. «Mid-Pliocene warmth: stronger greenhouse and stronger conveyor». En: *Marine Micropaleontology* 27.1 (1996). *Climates and Climate Variability of the Pliocene*, págs. 313-326. ISSN: 0377-8398. DOI: [https://doi.org/10.1016/0377-8398\(95\)00048-8](https://doi.org/10.1016/0377-8398(95)00048-8).
- [22] Bernhard Bereiter et al. «Revision of the EPICA Dome C CO₂ record from 800 to 600 kyr before present». En: *Geophysical Research Letters* 42.2 (2015), págs. 542-549. DOI: <https://doi.org/10.1002/2014GL061957>.
- [23] H. Graven et al. «Compiled records of carbon isotopes in atmospheric CO₂ for historical simulations in CMIP6». En: *Geoscientific Model Development* 10.12 (2017), págs. 4405-4417. DOI: [10.5194/gmd-10-4405-2017](https://doi.org/10.5194/gmd-10-4405-2017).

-
- [24] T. A. Rafter y G. J. Fergusson. «Atom Bomb Effect; Recent Increase of Carbon-14 Content of the Atmosphere and Biosphere». En: *Science* 126 (1957), págs. 557-558. DOI: [10.1126/science.126.3273.557](https://doi.org/10.1126/science.126.3273.557).
- [25] Tobias Naegler e Ingeborg Levin. «Closing the global radiocarbon budget 1945-2005». En: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 111.D12 (2006). DOI: <https://doi.org/10.1029/2005JD006758>.
- [26] Ingeborg Levin y Vago Heshaimer. «Radiocarbon - A Unique Tracer of Global Carbon Cycle Dynamics». En: *Radiocarbon* 42.1 (2000), págs. 69-80. DOI: [10.1017/S0033822200053066](https://doi.org/10.1017/S0033822200053066).
- [27] Hans E. Suess. «Radiocarbon Concentration in Modern Wood». En: *Science* 122.3166 (1955), págs. 415-417. DOI: [10.1126/science.122.3166.415.b](https://doi.org/10.1126/science.122.3166.415.b).
- [28] Reto Knutti y Gabriele C. Hegerl. «The equilibrium sensitivity of the Earth's temperature to radiation changes». En: *Nature Geoscience* 1.11 (nov. de 2008). Date: 2008/11/01, págs. 735-743. ISSN: 1752-0908. DOI: [10.1038/ngeo337](https://doi.org/10.1038/ngeo337).
- [29] Myles R. Allen y William J. Ingram. «Constraints on future changes in climate and the hydrologic cycle». En: *Nature* 419.6903 (oct. de 2002). Date: 2002/09/01, págs. 224-232. ISSN: 1476-4687. DOI: [10.1038/nature01092](https://doi.org/10.1038/nature01092).
- [30] Isaac M. Held y Brian J. Soden. «Water Vapor Feedback and Global Warming». En: *Annual Review of Environment and Resources* 25 (2000), págs. 441-475. ISSN: 1545-2050. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev.energy.25.1.441>.
- [31] X. Lan, K. W. Thoning y E. J. Dlugokencky. *Trends in Globally-Averaged CH₄, N₂O, and SF₆ Determined from NOAA Global Monitoring Laboratory Measurements. Version 2025-12*. DOI: [10.15138/P8XG-AA10](https://doi.org/10.15138/P8XG-AA10).
- [32] Laetitia Louergue et al. «Orbital and millennial-scale features of atmospheric CH₄ over the past 800,000 years». En: *Nature* 453.7193 (2008), págs. 383-386. ISSN: 1476-4687. DOI: [10.1038/nature06950](https://doi.org/10.1038/nature06950).

-
- [33] V. Naik et al. «Preindustrial to present-day changes in tropospheric hydroxyl radical and methane lifetime from the Atmospheric Chemistry and Climate Model Intercomparison Project (ACCMIP)». En: *Atmospheric Chemistry and Physics* 13.10 (2013), págs. 5277-5298. DOI: [10.5194/acp-13-5277-2013](https://doi.org/10.5194/acp-13-5277-2013).
- [34] Jos Lelieveld y Paul J. Crutzen. «Indirect chemical effects of methane on climate warming». En: *Nature* 355.6358 (ene. de 1992). Date: 1992/01/01, págs. 339-342. ISSN: 1476-4687. DOI: [10.1038/355339a0](https://doi.org/10.1038/355339a0).
- [35] M. Saunio et al. «Global Methane Budget 2000-2020». En: *Earth System Science Data* 17.5 (2025), págs. 1873-1958. DOI: [10.5194/essd-17-1873-2025](https://doi.org/10.5194/essd-17-1873-2025).
- [36] P. Forster et al. «Changes in Atmospheric Constituents and in Radiative Forcing». En: *Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Ed. por S. Solomon et al. Cambridge, United Kingdom y New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2007.
- [37] Adrian Schilt et al. «Glacial-interglacial and millennial-scale variations in the atmospheric nitrous oxide concentration during the last 800,000 years». En: *Quaternary Science Reviews* 29.1 (2010). Climate of the Last Million Years: New Insights from EPICA and Other Records, págs. 182-192. ISSN: 0277-3791. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.quascirev.2009.03.011>.
- [38] James N. Galloway et al. «Transformation of the Nitrogen Cycle: Recent Trends, Questions, and Potential Solutions». En: *Science* 320.5878 (2008), págs. 889-892. DOI: [10.1126/science.1136674](https://doi.org/10.1126/science.1136674).
- [39] P. Suntharalingam y J. L. Sarmiento. «Factors governing the oceanic nitrous oxide distribution: Simulations with an ocean general circulation model». En: *Global Biogeochemical Cycles* 14.1 (2000), págs. 429-454. DOI: <https://doi.org/10.1029/1999GB900032>.

-
- [40] G. Myhre et al. «Anthropogenic and natural radiative forcing». En: *Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Ed. por T. F. Stocker et al. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2013, págs. 659-740. DOI: [10.1017/CB09781107415324.018](https://doi.org/10.1017/CB09781107415324.018).
- [41] H. Tian et al. «Global nitrous oxide budget (1980–2020)». En: *Earth System Science Data* 16.6 (2024), págs. 2543-2604. DOI: [10.5194/essd-16-2543-2024](https://doi.org/10.5194/essd-16-2543-2024).
- [42] A. R. Ravishankara, John S. Daniel y Robert W. Portmann. «Nitrous Oxide (N₂O): The Dominant Ozone-Depleting Substance Emitted in the 21st Century». En: *Science* 326.5949 (2009), págs. 123-125. DOI: [10.1126/science.1176985](https://doi.org/10.1126/science.1176985).
- [43] Paul J. Crutzen et al. «N₂O Release from Agro-biofuel Production Negates Global Warming Reduction by Replacing Fossil Fuels». En: *Paul J. Crutzen: A Pioneer on Atmospheric Chemistry and Climate Change in the Anthropocene*. Ed. por Paul J. Crutzen y Hans Günter Brauch. Cham: Springer International Publishing, 2016, págs. 227-238. ISBN: 978-3-319-27460-7. DOI: [10.1007/978-3-319-27460-7_12](https://doi.org/10.1007/978-3-319-27460-7_12).
- [44] NASA's Goddard Space Flight Center. *Ozone Hole Watch Figure*. Produced by Eric R. Nash (NASA/GSFC SSAI) and Paul A. Newman (NASA/GSFC). Figure from NASA Ozone Hole Watch. 2023. URL: <https://ozonewatch.gsfc.nasa.gov/> (visitado 20-05-2024).
- [45] Thomas Jr. Midgley y Albert L. Henne. «Organic Fluorides as Refrigerants». En: *Industrial & Engineering Chemistry* 22.5 (1930), págs. 542-545. URL: <https://doi.org/10.1021/ie50245a031>.
- [46] Mario J. Molina y F. S. Rowland. «Stratospheric sink for chlorofluoromethanes: chlorine atom-catalysed destruction of ozone». En: *Nature* 249 (1974), págs. 810-812.
- [47] F. Sherwood Rowland. «Stratospheric Ozone Depletion by Chlorofluorocarbons». En: *Ambio* 19.6/7 (1990), págs. 281-292.

-
- [48] Chris Smith et al. *ClimateIndicator/data: Indicators of Global Climate Change 2023 revision 2*. Ver. v2024.05.29b. Zenodo, mayo de 2024. DOI: [10.5281/zenodo.11388387](https://doi.org/10.5281/zenodo.11388387).
- [49] J. C. Farman, B. G. Gardiner y J. D. Shanklin. «Large losses of total ozone in Antarctica reveal seasonal ClO_x/NO_x interaction». En: *Nature* 315.6016 (mayo de 1985), págs. 207-210. ISSN: 1476-4687. DOI: [10.1038/315207a0](https://doi.org/10.1038/315207a0).
- [50] S. A. Montzka, E. J. Dlugokencky y J. H. Butler. «Non-CO₂ greenhouse gases and climate change». En: *Nature* 476.7358 (sep. de 2011). Date: 2011/08/01, págs. 43-50. ISSN: 1476-4687. DOI: [10.1038/nature10322](https://doi.org/10.1038/nature10322).
- [51] S. Solomon et al. «Persistence of climate changes due to a range of greenhouse gases». En: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 107.43 (2010), págs. 18354-18359. DOI: [10.1073/pnas.1006282107](https://doi.org/10.1073/pnas.1006282107).
- [52] Hua Zhang, JinXiu Wu y ZhongPing Shen. «Radiative Forcing and Global Warming Potential of Perfluorocarbons and Sulfur Hexafluoride». En: *Science China Earth Sciences* 54.5 (2011), págs. 764-772. ISSN: 1869-1897. DOI: [10.1007/s11430-010-4155-0](https://doi.org/10.1007/s11430-010-4155-0).

Capítulo 2

La matemática que hay detrás

Es fin de semana por la mañana, el café está listo y te sirves una taza mientras decides qué ver en la televisión. Vas cambiando de canal y te quedas atrapado en un documental sobre la operación *Cat Drop*,¹ llevada a cabo en la isla de Borneo en 1960. En dicha operación, el Reino Unido desplegó 14 000 gatos en paracaídas con la intención de controlar la población de ratas que estaba acabando con los cultivos de la región.

La razón de esta peculiar operación fue el uso de pesticidas para acabar con los mosquitos y detener el brote de malaria que estaba afectando a la población de la isla. Esta fumigación fue efectiva: la población de mosquitos se redujo; sin embargo, muchas otras especies también vieron reducidos sus números, entre ellas los gatos. Como reza el refrán: «cuando el gato no está, los ratones hacen fiesta», las ratas sobrevivieron a los pesticidas y, con vía libre, acabaron con los cultivos y extendieron otras enfermedades, como la peste negra.

Cuando terminas de ver el documental, te quedas pensando en todas las implicaciones y, cuando le das un sorbo reflexivo a tu café, ya se ha enfriado. Estos dos fenómenos, completamente aislados entre sí, como el aumento de las ratas al no tener depredadores y el enfriamiento de la taza de café, pueden expresarse de forma matemática, lo que se denomina **modelado matemático**.

Un modelo matemático no es más que la representación matemática del comportamiento de un sistema real. Estos pueden representarse de diversas formas: modelos estadísticos,

¹Caída del gato.

relaciones empíricas o teoría de juegos, por mencionar algunos. Otra forma de representación en la que nos basaremos de aquí en adelante son las **ecuaciones diferenciales**. En las siguientes secciones ahondaremos de manera más detallada en esta rama de las matemáticas.

2.1. Ecuaciones diferenciales

Comencemos la explicación de qué es una ecuación diferencial abordando por separado las palabras que la componen. Una **ecuación** es una igualdad entre dos expresiones. Un ejemplo sencillo es el siguiente truco de «magia»: piensa en un número, multiplícalo por cuatro, réstale tres, luego multiplícalo por dos, súmalo seis y, finalmente, divide entre el número que has pensado. El resultado es ocho, ¿verdad? Este truco se puede expresar con la siguiente ecuación:

$$\frac{2(4x - 3) + 6}{x} = 8, \quad (2.1)$$

esto funciona siempre y cuando el número que pensaste es distinto de cero. Ahora puedes usar este truco con quien quieras.

Por otra parte, una **derivada** representa la tasa o razón de cambio de una variable con respecto a otra. Un ejemplo sencillo es la velocidad, que es como cambia tu posición en el tiempo y esta derivada es la siguiente

$$v = \frac{dx}{dt}, \quad (2.2)$$

donde v es la velocidad, x es la posición y t el tiempo. Cuando una ecuación incluye derivadas, tenemos una ecuación diferencial. Finalmente un modelo matemático, basado en ecuaciones diferenciales es la ley de enfriamiento de Newton,¹ que representa la pérdida de calor, en forma de temperatura de una sustancia con el tiempo. Siendo el modelo como sigue

$$\frac{dT}{dt} = \kappa(T_a - T), \quad (2.3)$$

donde T es la temperatura de la sustancia, T_a es la temperatura del ambiente y κ es el

¹Isaac Newton (1643-1727) fue un físico, teólogo, alquimista y matemático inglés. Creador del cálculo, junto con Leibniz. Contribuyó en matemáticas, óptica, física y cosmología. Probablemente la mente más importante de la historia de la humanidad.

coeficiente de transferencia de calor.

Las ecuaciones diferenciales pueden clasificarse de diversas formas, esto con la finalidad de describir sus propiedades, pero principalmente para elegir el mejor método de solución, si bien en este proyecto de tesis nos enfocaremos en el uso de métodos numéricos como método de solución. Aún así, la siguiente clasificación es útil para poner en contexto el tipo de ecuaciones diferenciales empleadas.

2.2. Clasificación de Ecuaciones Diferenciales

Una forma de clasificar las ecuaciones diferenciales es la que permite saber si son ordinarias o parciales, lineales o no lineales, entre otras características. La siguiente lista se basa en lo propuesto por [1], cabe resaltar que existen otras propiedades y clases que pueden diferir de las aquí mostradas.

2.2.1. Ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales

Una de las clasificaciones más importantes de las ecuaciones diferenciales se basa en la cantidad de variables independientes de las que depende la función. Por ejemplo, en el caso de la ley de enfriamiento, la temperatura depende únicamente del tiempo. Este tipo de ecuaciones, donde solo interviene una variable independiente, se denominan **ecuaciones diferenciales ordinarias**. En cambio, si la función depende de dos o más variables independientes, hablamos de **ecuaciones diferenciales parciales**. Un ejemplo muy conocido de este tipo es la ecuación de onda, que se expresa de la siguiente manera:

$$\alpha^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2}, \quad (2.4)$$

donde α es una constante. Se observa que la variable u depende de dos variables x y t , además de que la nomenclatura cambia, en las ecuaciones diferenciales parciales la letra d se ve sustituida por ∂ , una especie de « d curvada».

2.2.2. Orden

Otro aspecto importante de las ecuaciones diferenciales es su **orden**. El orden de una ecuación diferencial está definido por la derivada de mayor grado que contiene. Por ejemplo, la Ec. (2.3) es una ecuación (ordinaria) de primer orden, mientras que la Ec. (2.4) es una ecuación (parcial) de segundo orden. Ejemplos de ecuaciones ordinarias de grados superiores son los siguientes

$$y'' + y' - 2y = e^t, \quad (2.5)$$

$$y''' + \text{sen}(t)y' - 2 = 0, \quad (2.6)$$

$$y'''' + y''' - yy' = 5t. \quad (2.7)$$

2.2.3. Ecuaciones lineales y no lineales

Una clasificación clave en las ecuaciones diferenciales es si son o no lineales. La forma general de una ecuación ordinaria lineal de orden n es

$$a_0(t)y^{(n)} + a_1(t)y^{(n-1)} + \cdots + a_n(t)y = g(t), \quad (2.8)$$

donde todos los términos $a_0, a_1, a_2 \dots a_n$ son constantes. Cualquier ecuación que no sea de la forma (2.8) es una ecuación **no lineal**. Aplicando este criterio, la Ec. (2.5) es lineal, mientras que las Ecuaciones (2.6) y (2.7) no lo son debido a la presencia de los términos $\text{sen}(t)$ y yy' , respectivamente.

Esta clasificación es relevante porque la presencia de no linealidades complica significativamente la resolución de los problemas. Además, como era de esperarse, la mayoría de los problemas relacionados con la física y la ingeniería son no lineales.

2.2.4. Sistemas de ecuaciones diferenciales

Hay problemas que necesitan más de una función para poder ser representados. A estos problemas se les llama **sistemas de ecuaciones diferenciales**. Un ejemplo de este tipo de clasificación son los modelos depredador-presa o de Lotka-Volterra, que son importantes en

la ecología. La forma general de este tipo de modelos es la siguiente

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= ax - \alpha xy, \\ \frac{dy}{dt} &= -cy + \gamma xy,\end{aligned}\tag{2.9}$$

donde $x(t)$ y $y(t)$ representan las poblaciones de presas y depredadores, que bien pueden ser las ratas y los gatos de la isla de Borneo. Las constantes a, α, c y γ dependen de las especies estudiadas.

2.3. Existencia de soluciones

Supongamos una ecuación diferencial ordinaria (EDO) de primer orden

$$y' = f(x, y)\tag{2.10}$$

una solución de dicha ecuación es una función $y = y(x)$ que satisface la igualdad planteada. Por ejemplo, la función $y(x) = \text{sen}(x)$ es solución de la ecuación diferencial $y' = \cos(x)$. Este tipo de soluciones exactas se obtienen analíticamente mediante técnicas como integración o expansión en series. Sin embargo, en problemas prácticos de ingeniería, biología o cosmología, muchas ecuaciones no admiten soluciones analíticas o los métodos requeridos son excesivamente complejos.

En tales casos, los métodos numéricos surgen como alternativa, proporcionando soluciones aproximadas con alta eficiencia computacional. Estos algoritmos, implementados en lenguajes como MATLAB, FORTRAN, C++ o Python, suelen requerir apenas unas líneas de código para generar aproximaciones precisas de una amplia variedad de ecuaciones diferenciales. Además, pueden ejecutarse incluso en ordenadores de bajo costo, lo que los hace accesibles para aplicaciones tanto académicas como industriales.

2.4. Problema de Valores Iniciales

Una ecuación diferencial aunada con valores específicos para la función desconocida en algún punto del dominio (la mayoría de ocasiones el dominio es el tiempo) es lo que se conoce como un Problema de Valores Iniciales (PVI) que se puede definir como sigue

$$\frac{du}{dt} = f(t, u); \quad u(t_0) = u_0, \quad (2.11)$$

donde u es la función desconocida dependiente de t y $f(t, u)$ es una función arbitraria. Mientras que t_0 es punto de partida en el tiempo y u_0 el valor de la función en ese punto, estos dos valores conforman la **condición inicial**.

Para resolver numéricamente un PVI de la forma (2.11) en un intervalo $[a, b]$, es necesario dividir dicho intervalo en n subintervalos. Este proceso, conocido como **discretización del dominio**, permite construir un dominio discreto sobre el cual se aplicarán los métodos numéricos. La distancia entre los puntos del dominio discreto h , denominada tamaño de paso, se define como: $h = (b - a)/n$. Con esta elección, el dominio estará compuesto por $n + 1$ puntos, con lo cual: $t_i = a + ih$, siendo $i = 0, 1, 2, \dots, n$. En términos sencillos, la discretización consiste en superponer una malla uniforme sobre el dominio continuo, dividiéndolo en intervalos de longitud h . Esto permite aproximar la solución del PVI en puntos específicos y avanzar de manera iterativa en el tiempo.

2.4.1. Ejemplo

A partir de este punto, el contenido adoptará un carácter más técnico. Para quienes no estén familiarizados con el cálculo, la lógica en las deducciones podrá seguirse de manera visual, mientras que los ejemplos numéricos podrán corroborarse con el uso de una calculadora de mano o incluso con lápiz y papel. Por el contrario, si posees formación en cálculo, esperando que este texto te resulte de utilidad y encuentres en él ideas provechosas. Con esto presente, comencemos con la deducción de los métodos numéricos.

Para ilustrar la utilidad de los métodos numéricos, lo primero que haremos será comparar la solución aproximada de un modelo con su solución exacta. Tomaremos el ejemplo propuesto

por [2]

$$\frac{dT}{dt} = \kappa(T_a - T),$$

esta EDO puede resolverse mediante separación de variables como sigue

$$\begin{aligned}\frac{dT}{T_a - T} &= \kappa dt \\ \ln(T - T_a) &= -\kappa t + c \\ T - T_a &= e^{-\kappa t} e^c,\end{aligned}$$

donde e^c es una constante de integración. Para obtener el valor de esta constante es necesaria la condición inicial, a un tiempo inicial t_0 , la temperatura es T_0 , esto se puede escribir como $T(0) = T_0$.

$$\begin{aligned}T - T_a &= e^{-\kappa(0)} e^c \\ T_0 - T_a &= e^c,\end{aligned}$$

con esto la solución completa es la siguiente

$$\boxed{T = T_a + (T_0 - T_a)e^{-\kappa t}}. \quad (2.12)$$

Aplicando esta solución al enfriamiento de una taza de café con una temperatura inicial de 90 °C dentro de una habitación a 20 °C, el coeficiente de transferencia de calor para este caso es $\kappa = 0,03 \text{ min}^{-1}$. La Figura 2.1 representa la solución para la taza propuesta.

2.5. Método de Euler

El método numérico más sencillo es el de Euler.^{III} La derivación del método de Euler esta adaptada de [2]. Sabemos que la condición inicial indica que a un t_0 le corresponde un valor de u_0 y que la pendiente de u con respecto a t es la función $f(t, u)$. Por lo tanto, la pendiente

^{III}Leonhard Euler (1707-1783) fue un matemático, lógico y astrónomo suizo. Con grandes contribuciones a la ciencia en matemáticas, dinámica de fluidos y óptica por mencionar muy pocos. Fue un genio en toda la extensión de la palabra.

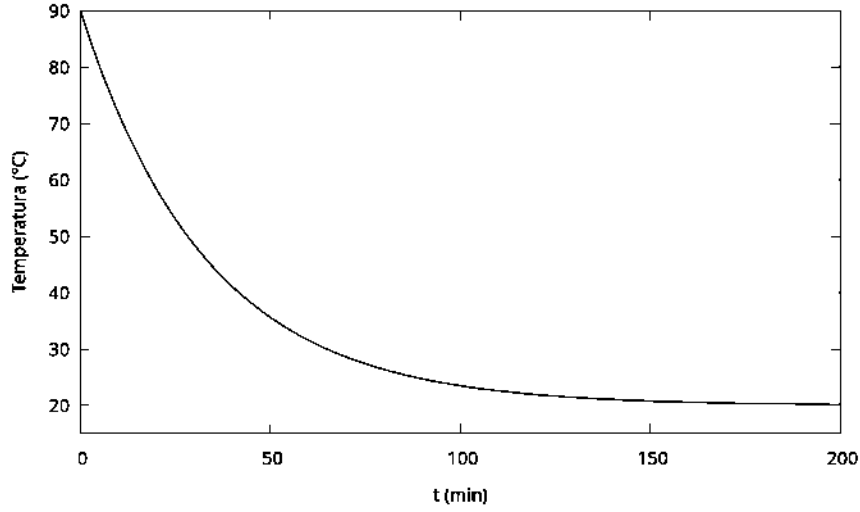


Figura 2.1: Solución exacta a la ley de enfriamiento de Newton para una temperatura inicial de 90 °C y una temperatura ambiente de 20 °C. Aproximadamente a las 2 horas y media (150 minutos) el café en la taza ha alcanzado la temperatura ambiente.

en este punto es $f(t_0, u_0)$. Esta pendiente se muestra en la Figura 2.2 y se representa como sigue

$$\left. \frac{du}{dt} \right|_{t_0, u_0} = \frac{u_1 - u_0}{t_1 - t_0}, \quad (2.13)$$

comparando la expresión anterior con la Ec. (2.11) obtenemos

$$\left. \frac{du}{dt} \right|_{t_0, u_0} = \frac{u_1 - u_0}{t_1 - t_0} = f(t_0, u_0),$$

despejando u_1

$$u_1 = u_0 + f(t_0, u_0)(t_1 - t_0),$$

sea $(t_1 - t_0)$ el tamaño de paso h , nos queda

$$u_1 = u_0 + f(t_0, u_0)h. \quad (2.14)$$

Para calcular el siguiente valor u_2 la lógica se mantiene por lo que tenemos lo siguiente

$$u_2 = u_1 + f(t_1, u_1)h,$$

$$t_1 = t_0 + h,$$

de manera general para estimar el valor u_{i+1}

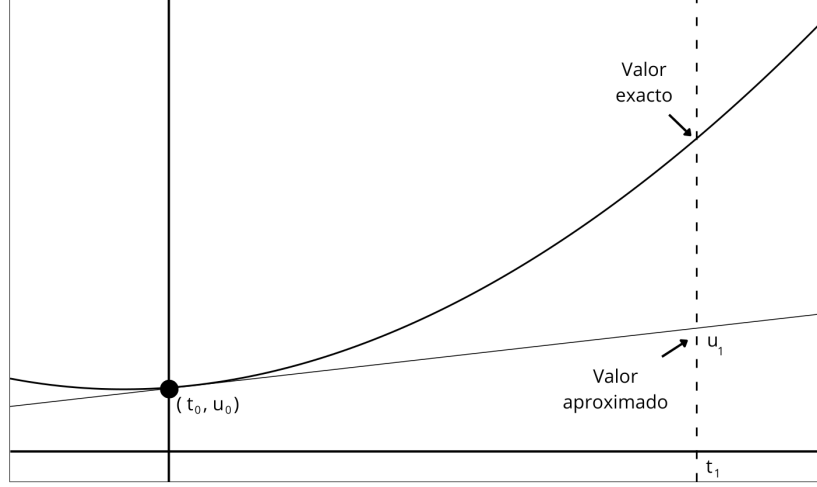


Figura 2.2: Representación gráfica de la primera iteración del método de Euler. La línea gruesa representa la solución exacta, mientras que la línea recta representa la línea tangente de la solución exacta. El punto u_1 es la solución numérica aproximada.

$$u_{i+1} = u_i + f(t_i, u_i)h. \quad (2.15)$$

Siendo la Ec. (2.15) el método de Euler para resolver ecuaciones diferenciales.

2.5.1. Derivación del método de Euler por series de Taylor

Se puede llegar a la Ec.(2.15) de una manera mas formal mediante series de Taylor, siguiendo la idea central de [2], el desarrollo matemático aquí presentado tiene un orden distinto. La expansión de esta serie alrededor del punto u_{i+1} se representa como sigue

$$u_{i+1} = u_i + \frac{du}{dt} \Big|_{t_i, u_i} (t_{i+1} - t_i) + \frac{1}{2!} \frac{d^2u}{dt^2} \Big|_{t_i, u_i} (t_{i+1} - t_i)^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3u}{dt^3} \Big|_{t_i, u_i} (t_{i+1} - t_i)^3 + \dots \quad (2.16)$$

recordando $du/dt = f(t, u)$ y $h = (t_{i+1} - t_i)$ la expresión anterior cambia

$$u_{i+1} = u_i + f(t_i, u_i)h + \frac{1}{2!} f'(t_i, u_i)h^2 + \frac{1}{3!} f''(t_i, u_i)h^3 + \dots \quad (2.17)$$

El método de Euler consiste en los primeros términos de la Ec. (2.17) como sigue

$$u_{i+1} = u_i + f(t_i, u_i)h + \mathcal{O}(h^2), \quad (2.18)$$

la diferencia entre la expresión anterior y la Ec. (2.15) radica en que esta última incorpora un error de truncamiento. El término de error $\mathcal{O}(h^2)$ surge al truncar la serie de Taylor después

del primer término, donde los términos de orden superior, al estar elevados a potencias mayores que dos, tienen una menor contribución por lo que el error local es de orden dos.

La discrepancia entre la solución exacta y la aproximación numérica u_{i+1} en el punto t_{i+1} constituye el **error local**. No obstante, al aplicar el método de Euler a lo largo de todo el dominio discretizado, este error se acumula progresivamente en cada paso. Esta acumulación de errores locales se denomina **error global**. Dado que este error es proporcional al número de puntos en el dominio $n\mathcal{O}(h^2)$, y considerando que el tamaño de paso se define como $h = (b - a)/n$, obtenemos que $n = (b - a)/h$. Sustituyendo esta relación, encontramos que el error global resulta de orden uno $\mathcal{O}(h)$.

2.5.2. Convergencia

Hemos deducido que el error global del método de Euler es de primer grado. Entonces, ¿qué significa esto? Indica que, al reducir el tamaño del paso h , es decir, al aumentar el número de puntos del dominio discreto n , la solución numérica debe aproximarse a la solución exacta. Para ejemplificar lo anterior la siguiente explicación reproduce el contenido de [2]: supongamos que tenemos dos soluciones con distinta resolución, u_i^1 con resolución h y u_i^2 con resolución $h/2$. Comparando la precisión de estas soluciones, podemos hacer la comparación en cada punto del dominio numérico como sigue

$$\begin{aligned} u_i^1 &= u_i^e + E(t_i)h, \\ u_i^2 &= u_i^e + E(t_i)\frac{h}{2}, \end{aligned}$$

donde u_i^e representa a la solución exacta y $E(t_i)$ al error acumulado de t_0 a t_n . De lo anterior podemos definir al **factor de convergencia** de la solución numérica

$$F_c = \frac{u_i^1 - u_i^e}{u_i^2 - u_i^e} = \frac{h}{h/2} = 2. \quad (2.19)$$

El factor de convergencia (F_c) nos proporciona un criterio para saber si la solución numérica converge hacia la solución exacta. Pongamos esto en práctica con la ley de enfriamiento de Newton.

2.5.3. Aplicación del método de Euler

Para construir la solución numérica, seguiremos la metodología propuesta por [2], lo primero será identificar y asignar todos los términos asociados a la ley de enfriamiento. Así el tiempo t se mantiene igual y la función u es T . El dominio discreto estará dado por $t_i = ih$ para $i = 0, 1, 2 \dots n$ y los valores de temperatura serán $T_i = T(t_i)$. Aplicando la Ec. (2.15) a la Ec. (2.3) para un tiempo t_i a t_{i+1} nos queda

$$\begin{aligned} T_{i+1} &= T_i + \left. \frac{dT}{dt} \right|_{t_i} h \\ &= T_i + \kappa(T_a - T_i)h. \end{aligned} \tag{2.20}$$

siendo esta la fórmula que emplearemos para obtener los valores numéricos, junto con los parámetros empleados en la solución exacta: $T_a = 20$ °C, $\kappa = 0,03 \text{ min}^{-1}$ y $T_0 = 90$ °C. Para el dominio discreto el tiempo final es $t_f = 200$ min y la número de puntos $n = 100$, por lo que el tamaño de paso es $h = t_f/n = 2$ min. Calculemos algunos valores de temperatura. Esto se puede hacer mediante una calculadora.

$$\begin{aligned} T_1 &= T_0 + \kappa(T_a - T_0)h \\ &= 90 + 0,03(20 - 90)2 \\ &= 85,8 \\ T_2 &= T_1 + \kappa(T_a - T_1)h \\ &= 85,8 + 0,03(20 - 85,8)2 \\ &= 81,852 \\ T_{10} &= 57,703 \\ T_{50} &= 23,1741 \\ T_{70} &= 20,9205 \\ T_{100} &= 20,144. \end{aligned}$$

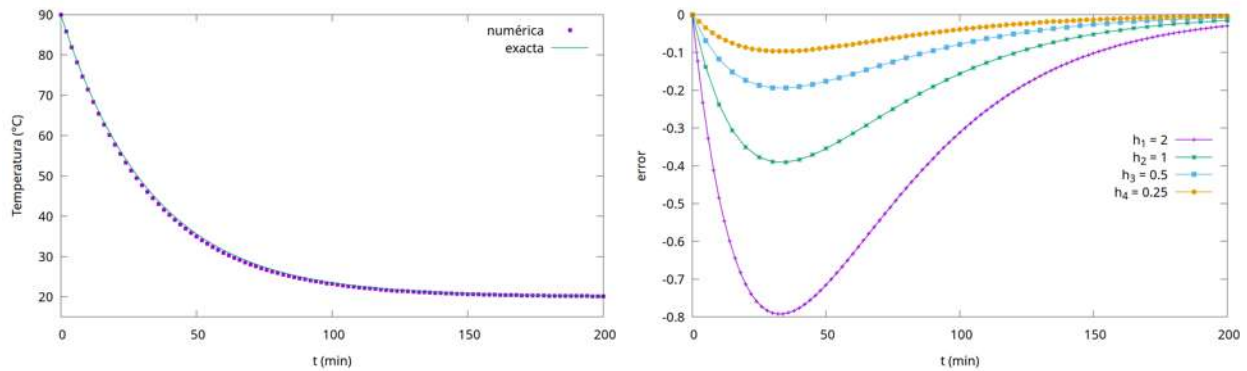


Figura 2.3: A la izquierda comparativa entre la solución exacta y la solución numérica usando el método de Euler para la ley de enfriamiento de Newton, empleando una resolución $h = 2$. A la derecha la comparativa del error usando cuatro resoluciones distintas.

La solución en el punto t_{100} nos da una temperatura cercana a la temperatura ambiente. Puedes comprobar los cálculos por tu cuenta u obtener algunos de los valores intermedios que no se muestran. Si tienes un termómetro en casa, puedes hacer la prueba: solo necesitas medir la temperatura de la taza de café y la del ambiente para comprobar cómo funciona la ley de enfriamiento de Newton.

Una vez obtenida la solución numérica, hay que comprobar si el error se comporta de acuerdo con la Ec.(2.19). El error global se puede denotar como $e(h) = T_i - T_i^e$, donde T_i^e es la solución exacta obtenida mediante la Ec. (2.12), evaluada en cada punto del dominio discreto. Al calcular la solución numérica con resoluciones más altas, comprobaremos si se cumple el factor de convergencia. Las resoluciones serán las siguientes: $h_1 = 2$, $h_2 = h_1/2 = 1$, $h_3 = h_2/2 = 0,5$ y $h_4 = h_3/2 = 0,25$. En la Figura 2.3 se muestra la comparación de la solución exacta con la numérica, así como el criterio de convergencia.

Al observar el comportamiento del error, se observa que el obtenido con la resolución h_1 es el doble que el obtenido con la resolución h_2 . A su vez el error de la resolución h_2 es el doble que el obtenido con la resolución h_3 y así sucesivamente, cumpliendo con el factor de convergencia (2.19). En general, el error de una solución calculada con una resolución h_j es el doble que el obtenido con las resoluciones h_{j+1} para $j = 1, 2, 3$. Por lo tanto, se puede afirmar que la solución numérica converge a la solución exacta a un ritmo constante.

2.6. Métodos de Runge-Kutta

El método de Euler se basa en la pendiente de la solución en un tiempo t_i para obtener la solución en el punto u_{i+1} . Una estrategia diferente que también utiliza pendientes son los métodos de Runge-Kutta (RK),^{iv} que proponen una expresión general para la determinación de éstas, siendo la solución u_{i+1}

$$u_{i+1} = u_i + \alpha(t_i, u_i)h, \quad (2.21)$$

donde α es la pendiente de la línea empleada para obtener la solución u_{i+1} . Los métodos RK asumen que α es una combinación lineal de pendientes

$$\alpha = a_1k_1 + a_2k_2 + a_3k_3 + \dots + a_mk_m, \quad (2.22)$$

donde k_m representa la pendiente de la solución numérica evaluada en el intervalo $[t_i, t_{i+1}]$ y se definen como sigue

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_i, u_i), \\ k_2 &= f(t_i + b_2h, u_i + c_{21}k_1h), \\ k_3 &= f(t_i + b_3h, u_i + h(c_{31}k_1 + c_{32}k_2)), \\ &\vdots \\ k_m &= f(t_i + b_mh, u_i + h(c_{m1}k_1h + \dots c_{m,m-1}k_{m-1})). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Observe que la pendiente k_1 es, de hecho, el método de Euler, y que k_2, k_3 etc., dependen de las pendientes previas. Los coeficientes b_j determinan dónde se evaluará la pendiente, mientras que los términos c_{mj} son coeficientes de las combinaciones lineales de las pendientes calculadas previamente. Estas constantes deben determinarse en función de la precisión del método.

Es común ver el método (2.23) representado en una Tabla Butcher (*Butcher tableau*), propuesta por John C. Butcher [3], quedando de forma general como sigue

^{iv}Carl Runge (1856-1927) matemático alemán.

^vMartin Kutta (1867-1944) matemático alemán, co-creador del método Runge-Kutta, junto a Carl Kutta.

$$\begin{array}{c|cccccc}
0 & & & & & \\
b_1 & c_{2,1} & & & & \\
b_2 & c_{3,1} & c_{3,2} & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
b_s & c_{s,1} & c_{s,2} & \dots & c_{s,s-1} & \\
\hline
& a_1 & a_2 & \dots & a_{s-1} & a_s
\end{array} \tag{2.24}$$

2.6.1. Runge-Kutta 2do orden

La metodología para la obtención del método de segundo orden de Runge-Kutta se basa en el desarrollo propuesto por [2], tomando las Ecs. (2.21) y (2.23), la expresión para dos pendientes es como sigue

$$\begin{aligned}
u_{i+1} &= u_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2)h, \\
k_1 &= f(t_i, u_i), \\
k_2 &= f(t_i + b_2 h, u_i + c_{21} k_1 h).
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Al obtener el método de Euler por medio de series de Taylor truncamos la serie en la primer derivada. Para el método de segundo orden se toma en cuenta la segunda derivada de la Ec. (2.17), quedando como sigue

$$u_{i+1} = u_i + f(t_i, u_i)h + \frac{1}{2!} f'(t_i, u_i)h^2 + \mathcal{O}(h^3), \tag{2.26}$$

la segunda derivada implica tener que calcular la derivada parcial, esto se hace mediante la siguiente fórmula

$$f'(u, t) = \frac{\partial f(u, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u, t)}{\partial u} \frac{du}{dt} \tag{2.27}$$

aplicando lo anterior a la Ec. (2.26) obtenemos

$$\begin{aligned}
u_{i+1} &= u_i + f(t_i, u_i)h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f(u, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u, t)}{\partial u} \frac{du}{dt} \right) \Bigg|_{t_i} h^2 + \mathcal{O}(h^3), \\
u_{i+1} &= u_i + f(t_i, u_i)h + \left(\frac{1}{2} \frac{\partial f(u, t)}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial f(u, t)}{\partial u} \frac{du}{dt} \right) \Bigg|_{t_i} h^2 + \mathcal{O}(h^3).
\end{aligned} \tag{2.28}$$

El término k_2 de la Ec. (2.25) puede ser escrito como una expansión de Taylor de **dos**

variables, dicha expansión en un punto (c, d) tiene la forma

$$f(x, y) = f(c, d) + \left[\frac{\partial f(c, d)}{\partial x}(x - c) + \frac{\partial f(c, d)}{\partial y}(y - d) \right] + \frac{1}{2!} \left[\frac{\partial^2 f(c, d)}{\partial x^2}(x - c)^2 + 2 \frac{\partial^2 f(c, d)}{\partial x \partial y}(x - c)(y - d) + \frac{\partial^2 f(c, d)}{\partial y^2}(y - d)^2 \right] \dots \quad (2.29)$$

aplicando la expansión anterior en k_2 tenemos

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_i, u_i), \\ k_2 &= f(t_i + b_1 h, u_i + c_1 k_1 h) \\ &= f(t_i, u_i) + b_2 \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{t_i} h + c_{21} k_1 \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{t_i} h + \mathcal{O}(h^2), \end{aligned}$$

sustituyendo la nueva versión de k_2 en u_{i+1} de la Ec. (2.25) nos da como resultado

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_i + \left[a_1 f(t_i, u_i) + a_2 \left(f(t_i, u_i) + b_2 \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{t_i} h + c_{21} k_1 \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{t_i} h \right) \right] h^2 + \mathcal{O}(h^3), \\ &= u_i + a_1 f(t_i, u_i) h + a_2 f(t_i, u_i) h + a_2 b_2 \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{t_i} h^2 + a_2 c_{21} k_1 \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{t_i} h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\ &= u_i + (a_1 + a_2) f(t_i, u_i) h + \left(a_2 b_2 \frac{\partial f}{\partial t} + a_2 c_{21} \frac{\partial f}{\partial t} \frac{du}{dt} \right) \Big|_{t_i} h^2 + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Haciendo una comparación de las Ec. (2.28) y la Ec. (2.30) se observa

$$\begin{aligned} a_1 + a_2 &= 1, \\ a_2 b_2 &= \frac{1}{2}, \\ a_2 c_{21} &= \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

lo que es un sistema de tres ecuaciones y cuatro incógnitas, lo que lo vuelve indeterminado.

Para determinar las constantes a_1, a_2, b_2 y c_{21} , expresamos todo en términos de a_2

$$\begin{aligned} a_1 &= 1 - a_2, \\ b_2 &= c_{21} = \frac{1}{2a_2}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Eligiendo valores de a_2 , podemos obtener versiones de la familia de Runge-Kutta de segundo

orden (RK2). Algunos de los ejemplos clásicos son los siguientes.

Método Heun

Si $a_2 = 1/2$, esto hace que el resto de las constantes sean: $a_1 = 1/2$ y $b_2 = c_{21} = 1$.

$$\begin{aligned}u_{i+1} &= u_i + \left(\frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2\right)h, \\k_1 &= f(t_i, u_i), \\k_2 &= f(t_i + h, u_i + k_1h).\end{aligned}\tag{2.32}$$

Método Midpoint

Ahora bien si $a_2 = 1$, entonces $a_1 = 0$ y $b_2 = c_{21} = 1/2$, tenemos el método Midpoint

$$\begin{aligned}u_{i+1} &= u_i + k_2h, \\k_1 &= f(t_i, u_i), \\k_2 &= f\left(t_i + \frac{1}{2}h, u_i + \frac{1}{2}k_1h\right).\end{aligned}\tag{2.33}$$

Método Ralston

Finalmente, el método de Ralston se obtiene si $a_2 = 2/3$, lo que deja el resto de constantes $a_1 = 1/3$ y $b_2 = c_{21} = 3/4$.

$$\begin{aligned}u_{i+1} &= u_i + \left(\frac{1}{3}k_1 + \frac{2}{3}k_2\right)h, \\k_1 &= f(t_i, u_i), \\k_2 &= f\left(t_i + \frac{3}{4}h, u_i + \frac{3}{4}k_1h\right).\end{aligned}\tag{2.34}$$

Tabla de Butcher para los métodos RK2

La familia de métodos RK2 puede resumirse usando tablas de Butcher, tal como se muestra en la Tabla [2.1](#).

Cuadro 2.1: Tablas de Butcher para métodos Runge-Kutta de segundo orden

Método Heun	Método Midpoint	Método Ralston
0 1 1	0 1/2 1/2	0 3/4 3/4
1/2 1/2	1 1	1/3 2/3

Cuadro 2.2: Tablas de Butcher para métodos Runge-Kutta de cuarto orden.

Método Clásico	Regla 3/8
0 1/2 1/2 1/2 0 1/2 1 0 0 1	0 1/3 1/3 2/3 -1/3 1 1 1 -1 1
1/6 2/6 2/6 1/6	1/8 3/8 3/8 1/8

2.6.2. Métodos de Runge-Kutta de 4to Orden

Tras haber detallado la formulación del métodos de la familia RK2, los métodos de órdenes más altos se construyen siguiendo la misma lógica que no se desarrollará aquí. La forma general del método de cuarto orden de Runge-Kutta (RK4) es la siguiente

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_i, u_i), \\
k_2 &= f(t_i + b_2 h, u_i + c_{21} k_1 h), \\
k_3 &= f(t_i + b_3 h, u_i + h(c_{31} k_1 + c_{32} k_2)), \\
k_4 &= f(t_i + b_4 h, u_i + h(c_{41} k_1 + c_{42} k_2 + c_{43} k_3)), \\
u_{i+1} &= u_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2 + a_3 k_3 + a_4 k_4) h + \mathcal{O}(h^5),
\end{aligned} \tag{2.35}$$

existen dos opciones en lo que respecta al método RK4: la versión clásica, la más popular, y la regla 3/8. La primera es la más empleada, pero la segunda es la más precisa [4]. En la Tabla 2.2 se muestran los valores de las constantes a , b y c para las dos versiones.

2.7. Modelo matemático

El PVI relacionado con la ley de enfriamiento de Newton consistió en una EDO de primer orden. No obstante, las EDO de segundo orden se usan ampliamente como modelos

matemáticos para una gran variedad de problemas físicos, como el movimiento de una masa en un resorte o el flujo de corriente eléctrica en un circuito. La forma general de estos PVI es la siguiente:

$$a\ddot{u} + b\dot{u} + cu = g(t), \quad u(t_0) = u_0, \quad \dot{u}(t_0) = \dot{u}_0. \quad (2.36)$$

Una relación fundamental entre matemáticas y física es que existe una gran cantidad de problemas físicos que comparten el mismo modelo matemático. La interpretación de las constantes a, b y c , así como de las funciones u y g , es lo que distingue a cada modelo. Uno de los problemas físicos que emplean la forma de la Ec.(2.36) son los osciladores armónicos. Dado que usaremos este modelo como base para gran parte del modelado matemático de esta tesis, es necesario conocer con mayor detalle las oscilaciones.

2.7.1. Oscilaciones

La EDO que representa oscilaciones y que tiene la forma (2.36), es la de un **oscilador amortiguado y forzado** y es como sigue

$$\ddot{x}(t) + \gamma\dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = H(t) \quad (2.37)$$

siendo $x(t)$ el desplazamiento del oscilador, ω_0 la frecuencia natural del oscilador, γ es el coeficiente de amortiguamiento y $H(t)$ es la fuerza externa. El análisis de la Ec. (2.37) se hará por partes, comenzando con el caso mas sencillo donde $\gamma = 0$ y $H(t) = 0$.

2.7.2. Oscilador armónico simple

Imaginemos una esfera de masa m colgando de un techo mediante un resorte. Si estiramos el resorte 1 m y lo soltamos, la esfera se moverá. El modelo que sirve para resolver este problema se puede construir por partes, como un lego. Sea $x(t)$ la altura de la masa en un tiempo t , donde $x = 0$ es la altura de la esfera en equilibrio. Dado que a $t = 0$ hemos desplazado la masa 1 m, la condición inicial es $x(0) = -1$. Como no hemos añadido velocidad al soltar la masa, la segunda condición inicial es $\dot{x}(0) = 0$. Lo anterior se representa mediante la Figura 2.4.

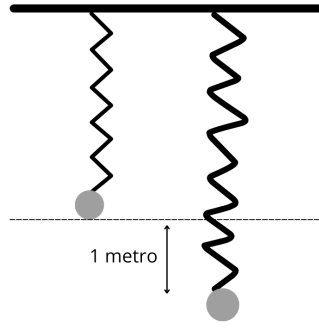


Figura 2.4: Esquema de una masa-resorte, donde la línea punteada indica la posición de equilibrio de la esfera.

En este modelo, la única fuerza que actúa sobre la esfera es la del resorte. El resorte intenta regresar a la posición de equilibrio, por lo que ejerce una fuerza F proporcional a la distancia a la que se encuentra la esfera del punto de equilibrio, también llamada fuerza restauradora. Por tanto, cuanto mayor sea la altura $x(t)$, mayor será la fuerza que ejerce el resorte para volver al equilibrio. Esta relación se puede expresar

$$F = -\kappa x(t), \quad (2.38)$$

donde κ es la constante elástica, que depende del material y la resistencia del resorte. Esta última ecuación es la ley de Hooke. Usando la segunda ley de Newton del movimiento que nos dice que la fuerza ejercida sobre un objeto es igual a la masa del objeto por la aceleración del mismo, tenemos

$$F = m\ddot{x} = -\kappa x(t), \quad (2.39)$$

podemos reescribir la ecuación anterior como

$$\ddot{x} = -\frac{\kappa}{m}x(t), \quad (2.40)$$

para cualquier distancia a la que se estire o comprima el resorte la solución general a la Ec. (2.40) es

$$x(t) = c_1 \cos\left(\sqrt{\frac{\kappa}{m}}t\right) + c_2 \sen\left(\sqrt{\frac{\kappa}{m}}t\right), \quad (2.41)$$

las constantes c_1 y c_2 son obtenidas usando las condiciones iniciales, siguiendo un procedi-

miento similar al realizado con la ley de enfriamiento.

2.7.3. Oscilador armónico amortiguado

En la realidad los osciladores presentan alguna forma de amortiguamiento que convierte la energía mecánica en calor, lo que eventualmente lleva al sistema al equilibrio. En el caso del resorte el amortiguamiento viene dado por la resistencia del aire al movimiento de la esfera y la resistencia del resorte mismo. El amortiguamiento es proporcional a la velocidad por lo que se añade el término $\gamma\dot{x}(t)$ a la Ec. (2.40) quedando

$$\ddot{x} - \gamma\dot{x}(t) - \omega_0^2 x(t) = 0 \quad (2.42)$$

donde $\omega_0 = \sqrt{\kappa/m}$. La ecuación anterior describe bastantes sistemas físicos, como son cuerdas vibrantes, ondas de sonido, etc. La solución exacta de la Ec. (2.42), se obtiene suponiendo una solución basada en la función exponencial, como sigue

$$x(t) = ce^{\sigma t}, \quad \dot{x}(t) = c\sigma e^{\sigma t}, \quad \ddot{x}(t) = c\sigma^2 e^{\sigma t};$$

sustituyendo lo anterior en la Ec.(2.42) nos queda

$$c\sigma^2 e^{\sigma t} + \gamma c\sigma e^{\sigma t} + \omega_0^2 e^{\sigma t} = 0, \quad (2.43)$$

dividiendo entre $e^{\sigma t}$ obtenemos la siguiente ecuación algebraica

$$\sigma^2 + \gamma\sigma + \omega_0^2 = 0, \quad (2.44)$$

cuyas soluciones son las siguientes

$$\sigma = -\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 - \omega_0^2}, \quad (2.45)$$

por lo que la solución general al oscilador amortiguado es

$$x(t) = e^{-\alpha t} [c_1 e^{t\beta} + c_2 e^{-t\beta}], \quad (2.46)$$
$$\alpha = \frac{\gamma}{2},$$
$$\beta = \sqrt{\alpha^2 - \omega_0^2},$$

dependiendo de la relación entre γ y $2\omega_0$, el comportamiento físico es distinto. Por tanto la solución $x(t)$ adopta diversas formas, que son las siguientes.

Subamortiguamiento $\gamma < 2\omega_0$

El caso de $\gamma < 2\omega_0$ se conoce como subamortiguamiento, en el que la esfera supera el punto inicial y adquiere un impulso extra para continuar oscilando antes de detenerse por completo. En este caso, también tenemos en cuenta que $\gamma = 0$. Si esto sucede, volvemos al oscilador simple. Para el caso subamortiguado, tenemos

$$\omega_u = \sqrt{\omega_0^2 - \alpha^2} \quad (2.47)$$

por lo que la solución y su derivada para este caso serían la siguientes

$$\begin{aligned} x(t) &= e^{-\alpha t} [c_1 \cos(\omega_u t) + c_2 \sin(\omega_u t)] \\ \dot{x}(t) &= -e^{-\alpha t} [(c_1 \omega_u + c_2 \alpha) \sin(\omega_u t) + (c_1 \alpha - c_2 \omega_u) \cos(\omega_u t)] \end{aligned} \quad (2.48)$$

Sobreamortiguamiento $\gamma > 2\omega_0$

En el caso sobreamortiguado, la esfera no oscila en exceso y llega directamente al punto de equilibrio, aunque de manera lenta y sin superarlo. En este caso, siendo $\gamma > 2\omega_0$, la solución y su derivada son

$$\begin{aligned} x(t) &= c_1 e^{-z_1 t} + c_2 e^{-z_2 t} \\ \dot{x}(t) &= -(c_1 z_1 e^{-z_1 t} + c_2 z_2 e^{-z_2 t}) \\ z_1 &= \frac{\gamma}{2} + \sqrt{\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 - \omega_0^2} \\ z_2 &= \frac{\gamma}{2} - \sqrt{\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 - \omega_0^2} \end{aligned} \quad (2.49)$$

Críticamente amortiguado $\gamma = 2\omega_0$

Finalmente, para el caso de que $\gamma = 2\omega_0$, la esfera se encuentra críticamente amortiguada, por lo que llega al equilibrio sin oscilar y de forma rápida. La solución y su derivada para este escenario son las siguiente:

$$\begin{aligned} x(t) &= (c_1 + c_2 t) e^{-\omega_0 t} \\ \dot{x}(t) &= -e^{-\omega_0 t} [c_1 \omega_0 + c_2 (\omega_0 - 1)] \end{aligned} \quad (2.50)$$

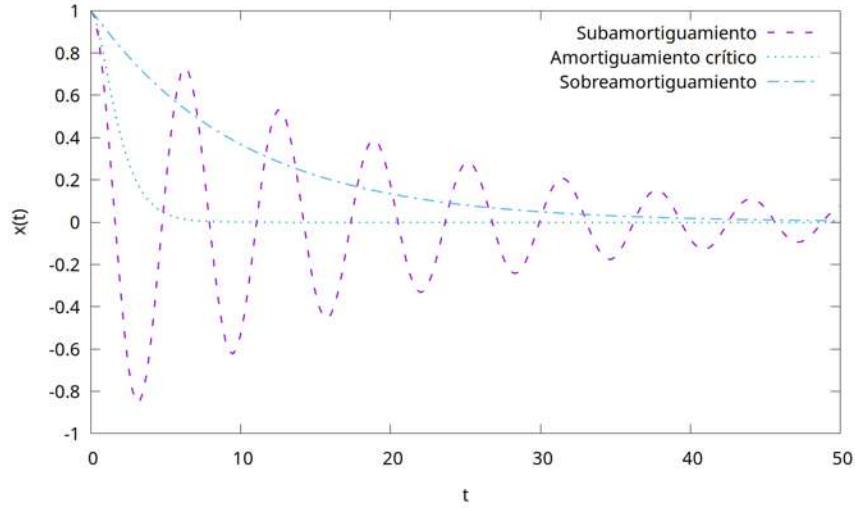


Figura 2.5: Comparación de distintos tipos de amortiguamiento. En la Ec. (2.42) se utilizaron distintos valores de γ para los tres tipos de amortiguamiento: sobreamortiguamiento ($\gamma = 10$), amortiguamiento crítico ($\gamma = 2$) y subamortiguamiento ($\gamma = 0,1$). En todos los casos, $\omega_0 = 1$ y las condiciones iniciales $(x_0, \dot{x}_0) = (1, 0)$.

Una comparación de un sistema subamortiguado, sobreamortiguado y críticamente amortiguado se muestra en la Figura 2.5.

2.7.4. Solución numérica de osciladores armónicos

Lo siguiente es resolver PVI asociados a osciladores armónicos. El movimiento de un sistema esfera-resorte está gobernado por el siguiente PVI

$$\ddot{x} + 0,25\dot{x} + 2x = 0, \quad x(0) = 0, \quad \dot{x}(0) = 2, \quad (2.51)$$

donde x se encuentra en centímetros y t en segundos, debemos determinar la posición de la esfera en cualquier momento. El oscilador armónico es una EDO de segundo orden, y los métodos RK descritos funcionan para ecuaciones de primer orden. Es posible escribir una EDO de segundo orden como un sistema de ecuaciones de primer orden. Para ello definimos $\dot{y} = x$ y la Ec. (2.51) que reescrita como

$$\dot{x} = y,$$

$$\dot{y} = -0,25y - 2x,$$

las condiciones iniciales ahora son $x(0) = x_0$ y $y(0) = \dot{x}_0$. Lo primero será evaluar la relación entre γ y $2\omega_0$. En este problema $\gamma = 0,25$ y $2\omega_0 = 4$, por lo que el oscilador se encuentra

subamortiguado. Por lo tanto, la solución viene dada por la Ec. (2.48). Al sustituir las condiciones iniciales obtenemos que las constantes adquieren los valores: $c_1 = 0$ y $c_2 = 16/\sqrt{127}$, por lo que la solución exacta para este PVI es la siguiente

$$x(t) = \frac{16}{\sqrt{127}} e^{-t/8} \sin\left(\frac{\sqrt{127}}{8} t\right). \quad (2.52)$$

La solución numérica se obtendrá usando los tres métodos RK2 (Heun, Ralston y Midpoint) y los dos RK4 (clásico y regla 3/8) y dos tamaños de paso $h_1 = 0,5$ y $h_2 = h_1/2 = 0,25$. Los resultados de se muestran en la Figura 2.6.

En la primera fila se muestra la solución exacta para el tamaño de paso h_1 . Las soluciones de los métodos numéricos son muy similares entre sí, pero se aprecia una gran diferencia entre las dos familias de métodos Runge-Kutta (RK2 y RK4), como se observa en la segunda fila, donde se muestran los errores entre la solución exacta y la numérica. Aumentar la resolución para el método RK2 no es suficiente para acercarse a la solución exacta, como se observa en la tercera fila, mientras que el método RK4 ofrece una solución más precisa. Finalmente, los errores correspondientes al tamaño de paso h_2 de la cuarta fila y la diferencia entre ambos métodos es cercanos a los dos órdenes de magnitud. Esto coincide con la diferencia en el orden de los métodos.

2.7.5. Convergencia de los métodos RK

En la Sección 2.5.2 introdujimos el concepto de convergencia de la solución numérica a la solución exacta conforme aumenta la resolución. Vamos a retomar este concepto y a generalizarlo. Construimos una solución para un PVI usando dos resoluciones h_1 y $h_2 = h_1/2$, y obtenemos dos soluciones u_i^1 y u_i^2 para un método de orden $i = 1, 2, \dots, n$. Teniendo como solución exacta u_i^e , se formulan las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} u_i^1 &= u_i^e + E(t_i)h^n, \\ u_i^2 &= u_i^e + E(t_i)\left(\frac{h}{2}\right)^n, \end{aligned} \quad (2.53)$$

la solución numérica se expresa en función de la solución exacta y de la suma del error, que

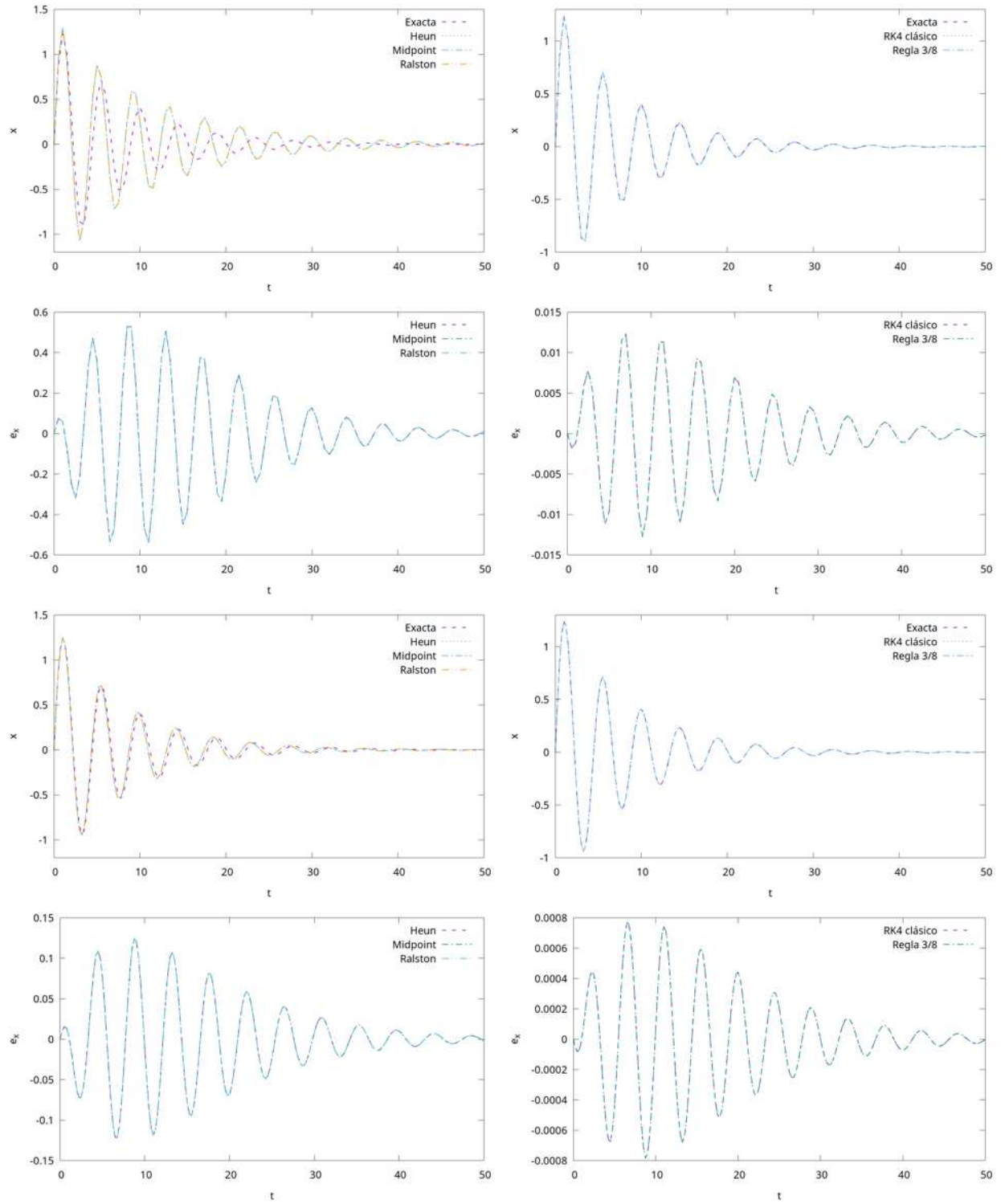


Figura 2.6: El mosaico compara soluciones de la Ec. (2.51). La mitad superior usa una resolución $h_1 = 0,5$: la primera fila muestra la solución (exacta vs. numérica) y la segunda, el error. La mitad inferior usa $h_2 = 0,25$, con la comparativa en la tercera fila y el error en la cuarta. La columna izquierda emplea los métodos RK2, mientras la derecha usa la familia RK4.

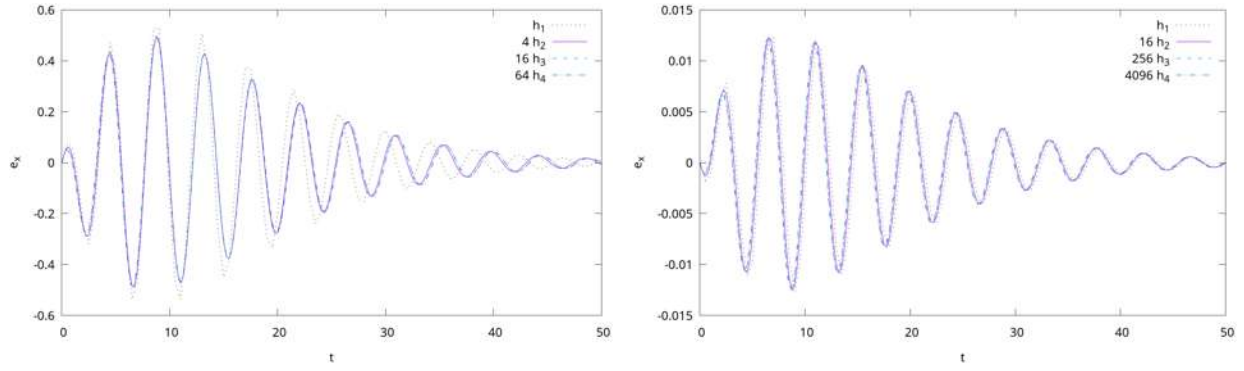


Figura 2.7: Pruebas de convergencia de la solución con dos métodos. A la izquierda el método de Ralston, donde los errores se reescalan mediante $2^2(h_2)$, $2^4(h_3)$ y $2^6(h_4)$. A la derecha la regla 3/8, donde los errores se reescalan mediante $4^2(h_2)$, $4^4(h_3)$ y $4^6(h_4)$. Las curvas se superponen de manera aproximada para ambos métodos.

es proporcional a h^n . Al comparar las dos expresiones, obtenemos el factor de convergencia

$$F_c = \frac{u_i^1 - u_i^e}{u_i^2 - u_i^e} \approx \frac{h^n}{\left(\frac{h}{2}\right)^n} = 2^n. \quad (2.54)$$

La relación es aproximada, ya que se desprecian los términos de orden mayor que $\mathcal{O}(h^n)$. De las relaciones anteriores se desprende que la solución converge con orden n hacia la solución exacta. El número 2^n es el factor de convergencia, donde n es el orden del método numérico.

Pongamos a prueba el factor de convergencia. Para ello, tomemos $h_1 = 0,5$ y $h_2 = 0,25$, las resoluciones empleadas en la solución del oscilador armónico amortiguado y agreguemos un par de resoluciones más: $h_3 = 0,125$ y $h_4 = 0,0625$. Nótese que las resoluciones elegidas mantienen la siguiente relación: $h_4 = h_3/2 = h_2/4 = h_1/8$. Los resultados de esta prueba se muestran en la Figura 2.7, donde se representa el error asociado a cada resolución. Los errores están reescalados para mostrar la convergencia de los métodos RK, siendo $n = 2$ para la familia RK2 y $n = 4$ para la familia RK4. La amplitud del error es similar para cada método. Es importante señalar que, dado que las soluciones de los métodos de cada familia RK son muy similares, solo se ha tomado un método de cada familia: Ralston para RK2 y la regla 3/8 para RK4.

Análisis dimensional del oscilador amortiguado

Retomemos el caso del oscilador armónico amortiguado, en el cual la esfera continúa oscilando con una frecuencia angular dada por la Ec. (2.47) y con una amplitud que decae

lentamente con el tiempo. Del PVI se establece que x está en centímetros y t en segundos, por lo que las unidades del sistema se expresan como:

$$\left[\frac{cm}{s^2}\right] \frac{d^2x}{dt^2} + \gamma \left[\frac{cm}{s}\right] \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 [cm]x = 0.$$

El modelo debe ser dimensionalmente consistente; por ello γ y ω_0 poseen unidades de $\frac{1}{s}$. Así, γ regula la rapidez con la que se amortigua la amplitud en cada oscilación, mientras que ω_0 determina el ritmo natural con el que el sistema tiende a oscilar en ausencia de amortiguamiento.

2.7.6. Oscilador forzado amortiguado

En todos los casos anteriores, las únicas fuerzas que actuaban sobre el sistema esfera-resorte eran el aire y el propio resorte. Sin embargo, hay sistemas en los que se añade una fuerza externa de forma periódica, como puede ser un motor conectado al resorte. Un sistema vibratorio se puede representar con el siguiente PVI

$$\ddot{x} + 0,125\dot{x} + x = 3 \cos 2t, \quad x(0) = 2, \quad \dot{x}(0) = 0, \quad (2.55)$$

al comparar con la Ec.(2.37), se observa que $\gamma = 0,125$, $\omega_0^2 = 1$ y la fuerza externa $H(t) = 3 \cos 2t$. En estos casos, la solución exacta se obtiene sumando la solución homogénea y la solución particular. La primera es implica hacer $H(t) = 0$, lo que nos deja con la ecuación característica

$$r^2 + 0,125r + 1 = 0,$$

siendo sus raíces

$$-\frac{1}{16} - \frac{\sqrt{225}}{16}i, \quad -\frac{1}{16} + \frac{\sqrt{225}}{16}i,$$

por lo que la solución homogénea es

$$x_h = c_1 e^{\frac{-t}{16}} \cos\left(\frac{\sqrt{225}}{16}t\right) + c_2 e^{\frac{-t}{16}} \sin\left(\frac{\sqrt{225}}{16}t\right). \quad (2.56)$$

La forma de la solución particular para una fuerza externa periódica es la siguiente:

$$x_p = A \cos 2t + B \sin 2t,$$

y dado que tenemos una EDO de segundo orden, hay que derivar dos veces

$$\begin{aligned}\dot{x}_p &= -2A \operatorname{sen}(2t) + 2B \cos(2t), \\ \ddot{x}_p &= -4A \cos(2t) - 4B \operatorname{sen}(2t),\end{aligned}$$

sustituyendo las expresiones anteriores en la Ec. (2.55) y simplificando operaciones obtenemos

$$(-3B - 0,25A) \operatorname{sen}(2t) + (-3A + 0,25B) \cos(2t) = 3 \cos 2t,$$

en consecuencia se deriva el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned}-3B - 0,25A &= 0, \\ 0,25B - 3A &= 3,\end{aligned}$$

resultando en $A = -144/145$ y $B = 12/145$. Finalmente la solución particular queda como sigue

$$x_p = -\frac{144}{145} \cos(2t) + \frac{12}{145} \sin(2t), \quad (2.57)$$

la solución general es la suma de las Ecs. (2.56) y (2.57)

$$x(t) = c_1 e^{\frac{-t}{16}} \cos(\delta t) + c_2 e^{\frac{-t}{16}} \operatorname{sen}(\delta t) - \frac{144}{145} \cos(2t) + \frac{12}{145} \sin(2t), \quad (2.58)$$

y su derivada

$$\dot{x}(t) = -e^{\frac{-t}{16}} \left[\left(c_1 \delta + \frac{c_2}{16} \right) \operatorname{sen}(\delta t) + \left(\frac{c_1}{16} - c_2 \delta \right) \cos(\delta t) \right] + \frac{24}{145} \cos(2t) + \frac{288}{145} \sin(2t), \quad (2.59)$$

donde $\delta = \frac{\sqrt{225}}{16}$. Las constantes c_1 y c_2 se obtienen sustituyendo las condiciones iniciales en las ecuaciones previas, lo que resulta en: $c_1 = \frac{434}{145}$ y $c_2 = \frac{10}{29\sqrt{255}}$. La solución del PVI (2.55) y su derivada son

$$x(t) = e^{\frac{-t}{16}} \left[\frac{434}{145} \cos(\delta t) + \frac{10}{29\sqrt{255}} \operatorname{sen}(\delta t) \right] - \frac{144}{145} \cos(2t) + \frac{12}{145} \sin(2t), \quad (2.60)$$

$$\dot{x}(t) = -e^{\frac{-t}{16}} \left[\frac{1384}{29\sqrt{255}} \operatorname{sen}(\delta t) - \frac{47}{1160} \cos(\delta t) \right] + \frac{24}{145} \cos(2t) + \frac{288}{145} \sin(2t). \quad (2.61)$$

Se contrastará la solución exacta con la obtenida mediante la regla 3/8 de RK4. Además,

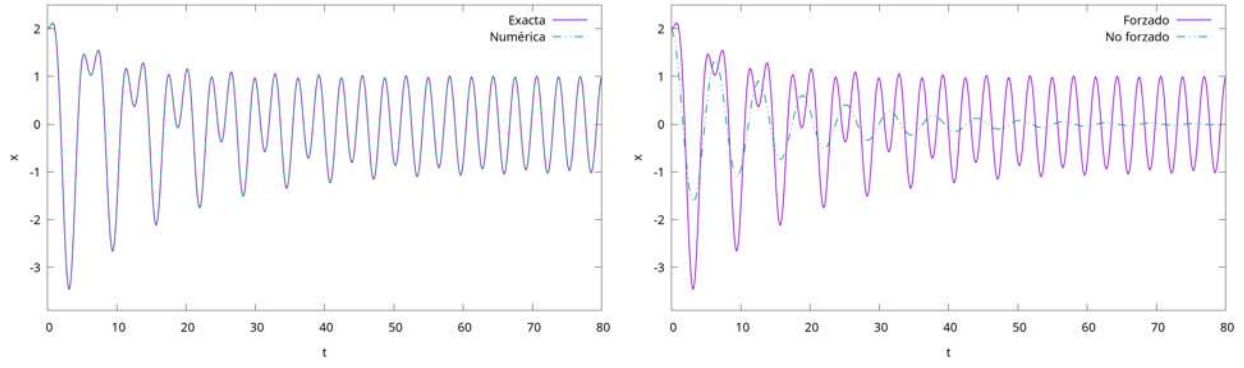


Figura 2.8: Solución del PVI (2.55) con resolución $h_1 = 0,125$. A la izquierda la comparativa entre la solución exacta y la numérica. A la derecha comparativa del comportamiento del oscilador forzado y sin forzamiento.

se comparará la dinámica forzada con la no forzada ($H = 0$) para visualizar el efecto que tiene la fuerza externa en el oscilador. Estos resultados se muestran en la Figura 2.8.

De las series temporales se pueden extraer algunas conclusiones respecto a las soluciones. Con una resolución $h_1 = 0,125$, la diferencia entre la solución exacta y la numérica es casi imperceptible. En el gráfico de la derecha se observan dos fases en el comportamiento: la primera, en la que el amortiguamiento γ disminuye la amplitud, y la segunda, en la que el movimiento de la esfera sigue a la fuente externa. Por el contrario, en el oscilador no forzado, el amortiguamiento lleva a la esfera al estado original de equilibrio.

2.7.7. Autoconvergencia

La construcción de la solución exacta para el oscilador armónico forzado ya no es de manera tan directa como si lo fue en el caso amortiguado y como veremos en la siguiente sección, añadir términos no lineales complica aún mas la deducción de soluciones exactas, o sin más, no existen. La motivación de los métodos numéricos es resolver ecuaciones cuya solución es desconocida, es por ello que factor de convergencia discutido previamente resulta inválido ante ecuaciones sin solución conocida.

No obstante, el criterio de convergencia sigue siendo válido para ecuaciones sin solución conocida, siendo ahora autoconvergencia. Supongamos una solución u_i^3 con resolución $h_3 = h_2/2 = h_1/4$. Dicha solución se expresa como sigue

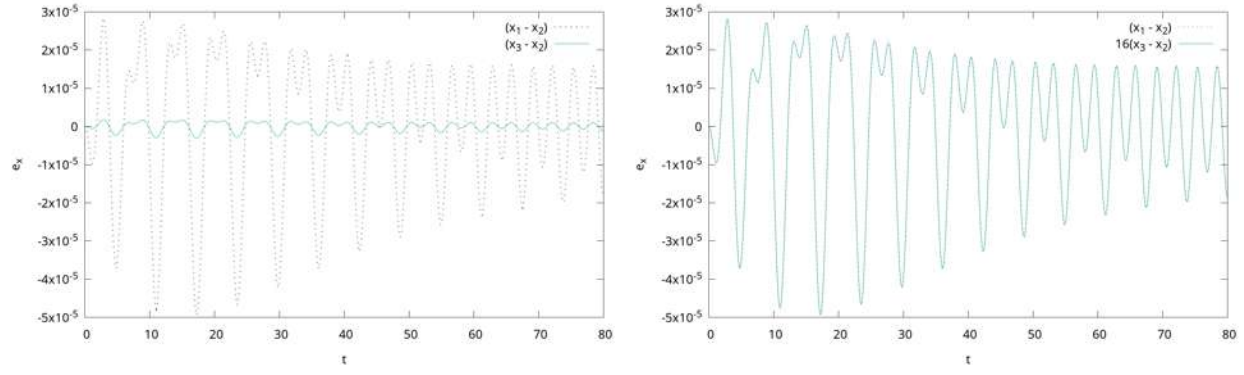


Figura 2.9: Pruebas de autoconvergencia. A la izquierda la diferencia entre las soluciones numéricas. En la derecha las mismas diferencias pero ahora escaladas usando el factor $2^4 = 16$, la superposición de las curvas indica que el criterio (2.63) se cumple.

$$u_i^3 = u_i^e + E \left(\frac{h}{4} \right)^n \quad (2.62)$$

combinando (2.62) con (2.54) obtenemos el factor de autoconvergencia

$$S_{CF} = \frac{u_1^1 - u_1^2}{u_1^2 - u_1^3} \approx \frac{h^n - \left(\frac{h}{2}\right)^n}{\left(\frac{h}{2}\right)^n - \left(\frac{h}{4}\right)^n} = \frac{\frac{(2h)^n - h^n}{2^n}}{\frac{(4h)^n - (2h)^n}{(2)^n(4)^n}} = \frac{(2^n - 1)4^n}{(2^n - 1)2^n} = 2^n \quad (2.63)$$

Si tres soluciones numéricas construidas con resoluciones proporcionales a un factor 2, obedecen la Ec. (2.63) se dice que la solución numérica converge en el continuo con orden n . Este criterio se usa para verificar que la solución numérica converge sin la necesidad de la solución exacta.

Usemos el criterio de autoconvergencia para el caso del oscilador armónico forzado construyendo dos soluciones extra con resoluciones $h_1 = 0,125$, $h_2 = h_1/2$ y $h_3 = h_2/2$. La prueba de autoconvergencia se muestra en la Figura 2.9.

2.7.8. Osciladores no lineales

Volvamos a nuestro sistema esfera-resorte, solo que ahora el resorte es muy duro o por el contrario permite que la esfera lo estire más allá de la deformación elástica (donde ya no puede recuperar su forma original), esto lleva a la aparición de nuevos comportamientos en el sistema. Este tipo de respuestas no lineales son importantes para modelar fenómenos en biología, ingeniería y física, uno de los osciladores no lineales más populares el oscilador de Duffing [5]

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \kappa_1 x + \kappa_2 x^3 = F_0 \sin(\Omega t), \quad (2.64)$$

se añade el término $\kappa_2 x^3$ a la fuerza restauradora. La interpretación de los parámetros es similar a la del oscilador forzado, siendo γ el coeficiente de amortiguamiento, κ_1 y κ_2 son los coeficientes de la fuerza restauradora, donde el primero controla la dureza del resorte y el segundo la magnitud de la no linealidad.

La inclusión del término $\kappa_2 x^3$ cambia la dinámica del oscilador, lo que lleva a nuevos métodos para la obtención de soluciones analíticas. Además la combinación de ciertos valores puede dar lugar a la aparición de caos. El caos es un fenómeno donde comportamientos impredecibles y aleatorios aparecen debido a que los sistemas no lineales son muy susceptibles a cambios en las condiciones iniciales, en la vida real el caos aparece en el estudio del clima o en el mercado bursátil [6]. El estudio del caos no forma parte de este trabajo, no obstante, resolver un oscilador Duffing con un comportamiento caótico es útil para demostrar la eficiencia de los métodos RK4.

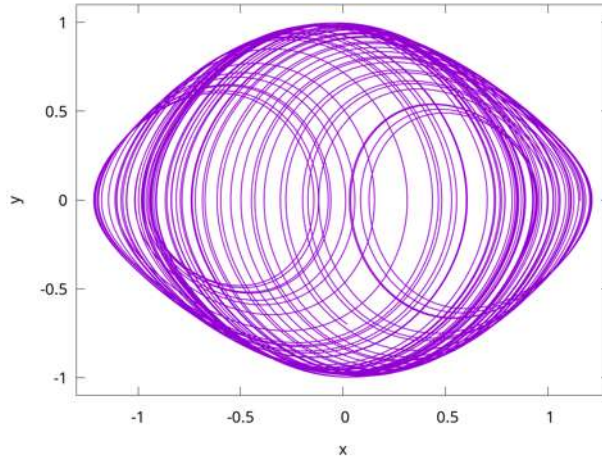


Figura 2.10: Solución en el espacio fase del oscilador Duffing (2.64) las condiciones iniciales son $(x_0, y_0) = (0,02, -0,7)$.

Un conjunto de valores específicos, representados por $(\gamma, F_0, \Omega) = (0,88, 1, 1)$, genera un comportamiento caótico en el oscilador Duffing. La solución en el diagrama espacio fase se muestra en la Figura 2.10. En la presencia de regímenes caóticos, la Ec. 2.63 no es suficiente para evaluar la capacidad de convergencia. Sin embargo, la regla 3/8 de RK4 resulta suficiente para resolver EDOs no lineales.

Hemos obtenido la EDO, que desempeñará un papel clave en el modelado matemático del calentamiento global. Sin embargo, es importante señalar que todos los problemas utilizados como ejemplos en este capítulo comparten una característica esencial: los valores de los parámetros ya estaban definidos. En el siguiente capítulo, abordaremos la estrategia implementada para resolver **la estimación de parámetros**.

Bibliografía

- [1] William E. Boyce y Richard C. DiPrima. *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*. 9.^a ed. Hoboken, NJ, USA: Wiley, 2017. ISBN: 9781119455018.
- [2] Francisco Guzmán. «Ordinary Differential Equations». En: *Numerical Methods for Initial Value Problems in Physics*. Springer Nature Switzerland, 2023, págs. 7-97. ISBN: 978-3-031-33556-3. DOI: [10.1007/978-3-031-33556-3_2](https://doi.org/10.1007/978-3-031-33556-3_2).
- [3] J. C. Butcher. «On Runge-Kutta processes of high order». En: *Journal of the Australian Mathematical Society* 4.2 (1964), págs. 179-194. DOI: [10.1017/S1446788700023387](https://doi.org/10.1017/S1446788700023387).
- [4] «Runge-Kutta and Extrapolation Methods». En: *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*. Springer Berlin Heidelberg, 1993, págs. 129-353. ISBN: 978-3-540-78862-1. DOI: [10.1007/978-3-540-78862-1_2](https://doi.org/10.1007/978-3-540-78862-1_2).
- [5] G. Duffing. *Erzwungene Schwingungen bei Veränderlicher Eigenfrequenz und ihre Technische Bedeutung*. Sammlung Vieweg, Heft 41/42. Braunschweig: Vieweg, 1918.
- [6] Catherine Kyrtsov y Michel Terraza. «Is it Possible to Study Chaotic and ARCH Behaviour Jointly? Application of a Noisy Mackey–Glass Equation with Heteroskedastic Errors to the Paris Stock Exchange Returns Series». En: *Computational Economics* 21.3 (jun. de 2003), págs. 257-276. ISSN: 1572-9974. DOI: [10.1023/A:1023939610962](https://doi.org/10.1023/A:1023939610962).

Capítulo 3

Algoritmo Genético

El principal obstáculo que enfrentan los modelos matemáticos basados en EDO radica en la estimación de parámetros. Esto es, asumiendo que el modelo sea correcto, se procederá a la búsqueda de los valores de los parámetros asociados que mejor se ajusten a un conjunto de datos, tales como series de tiempo. Para realizar la estimación de parámetros a partir de datos experimentales, existe una variedad de metodologías, entre las que se incluyen: la estimación bayesiana, los mínimos cuadrados y la optimización por enjambres de partículas, entre otras. Entre la diversa gama de métodos empleados, resaltan los algoritmos genéticos (AGs), cuyo funcionamiento se inspira en la teoría de la evolución de Charles Darwin: los individuos que mejor se adaptan a su medio sobreviven y se reproducen. David Goldberg [1] propuso los algoritmos genéticos a finales de la década de 1980. Estos algoritmos tienen la capacidad de producir soluciones de gran calidad a problemas de optimización.

Para la presente tesis, se ha programado un AG mediante el lenguaje de programación FORTRAN 90, al que se denominará **Mulo**, como el antagonista principal de la saga Fundación, de Isaac Asimov [2]. El Mulo es un ser humano que ha sufrido una mutación genética que le permite modificar las emociones de las personas. En los apartados subsiguientes se expondrá el funcionamiento general de un AG y se analizará en mayor profundidad el funcionamiento particular del Mulo.

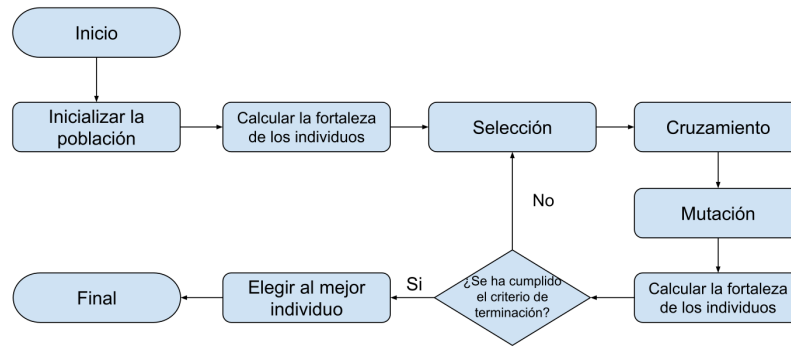


Figura 3.1: Diagrama de flujo para un algoritmo genético básico.

3.1. Funcionamiento de un algoritmo genético

De acuerdo con la propuesta de Darwin sobre la teoría de la evolución, los AG buscan la solución más óptima a un problema específico, manteniendo una población de soluciones denominadas **individuos**. El proceso de evaluación de soluciones en esta población se lleva a cabo de manera iterativa. En consecuencia, las mejores soluciones tienen una mayor probabilidad de ser seleccionadas para conformar una parte de la siguiente generación. Posteriormente, dichas soluciones son utilizadas para generar una nueva generación de soluciones. De este modo, conforme avanzan las generaciones, las soluciones resultan más adecuadas para resolver el problema planteado. Como se muestra en la Figura 3.1, se representa de manera esquemática el funcionamiento general de un algoritmo genético.

Las secciones siguientes dedicadas a la descripción de un algoritmo genético se basan en la estructura empleada por [3].

3.1.1. Población inicial

Las características que diferencian a un individuo de otro, independientemente de su especie, están determinadas por sus genes, conformando su ADN. Los algoritmos genéticos imitan esto, el ADN de los individuos está compuesto por genes, que a su vez se representan con los parámetros que componen la solución al problema en cuestión. En cada generación del AG, el número de individuos que conforman la población se mantiene constante. La primera generación se genera de manera aleatoria, puesto que, en la mayoría de los casos, no se

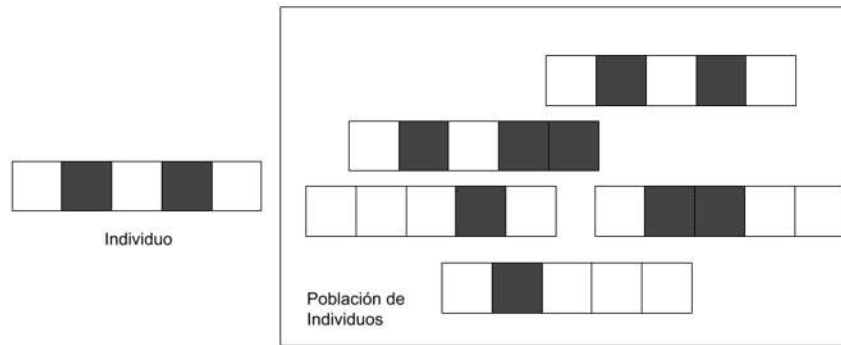


Figura 3.2: Representación de un individuo y de una población, donde cada cuadrado representa un gen. La representación de los genes es binaria, por lo que, el gen solo puede ser blanco o gris.

tiene conocimiento de la combinación de parámetros que producen soluciones satisfactorias. Como se muestra en la Figura 3.2, se representa de manera esquemática un individuo y una población.

En el Mulo, la población inicial se genera **siempre de manera aleatoria**. La cantidad de individuos que la conforman dependerá del problema que queramos resolver y se indicará de manera clara en cada caso.

3.1.2. Función de fortaleza

En cada iteración o generación del AG, la población es evaluada mediante una función de fortaleza y a cada individuo se le asigna un valor de *fitness*. Cuanto menor sea este valor, mejor será la solución proporcionada. Por otra parte, el valor de *fitness* tiene como segundo objetivo identificar las mejores soluciones para crear una fracción de la siguiente generación y, con ello, mejorar la calidad de la población de soluciones en cada generación.

En la sección anterior, los genes de la población se representaron de forma binaria (con blancos y grises). Sin embargo, en el Mulo los genes son los valores reales de los parámetros, denominados valores de punto flotante.¹ Por tanto, el Mulo es un algoritmo genético codificado de forma real. Además de que la población inicial se genera de manera aleatoria todas

¹Este es un formato utilizado en informática para representar números reales muy grandes o muy pequeños.

las soluciones de esta primera generación se **encuentran siempre comprendidas en el intervalo (0,1)**.

En el Mulo las funciones de fortaleza implementadas son las siguientes

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i|, \quad (3.1)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}, \quad (3.2)$$

$$\text{MAPE} = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right|, \quad (3.3)$$

$$\text{sMAPE} = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|\hat{y}_i - y_i|}{|y_i| + |\hat{y}_i|}, \quad (3.4)$$

donde, y_i representa los datos observacionales, mientras que $\hat{y}_i$ representa los datos generados mediante el modelo, es decir, «datos simulados». N se refiere a la cantidad de datos observacionales y, por ende, determina la cantidad de datos simulados. El uso de diversas funciones de fortaleza se justifica por el hecho de que algunas de ellas favorecen a los genes que representan las condiciones iniciales de la EDO, mientras que el resto de los parámetros no se ven afectados de la misma manera. En la gran mayoría de los casos, se implementa una combinación de funciones de fortaleza, y en cada caso se especifica la función o funciones utilizadas.

3.1.3. Selección

Una vez calculado el *fitness* de todos los individuos de la población, se lleva a cabo el proceso de selección, en el que se elige a una parte de los individuos para que pasen a la siguiente generación y se reproduzcan, creando una descendencia que completará la siguiente generación. Los individuos con mejor *fitness* tienen una mayor probabilidad de ser seleccionados; no obstante, esto no significa que los individuos con peor desempeño no puedan ser elegidos. En la naturaleza, los organismos mejor adaptados tienen más opciones de reproducirse, pero esto no excluye al resto, lo que permite mantener la variabilidad genética

y evitar el estancamiento de las soluciones.

Existen varios métodos de selección, algunos de los cuales son: torneo, rango, Boltzmann, muestreo universal estocástico o SUS (por sus siglas en inglés, *Stochastic Universal Sampling*). La técnica de selección empleada en el Mulo es la **ruleta elitista**. Este método es una modificación del método de la ruleta, que se explica a continuación.

Una vez calculado el valor de *fitness* de todos los individuos de la población, se procede con el proceso de selección, en el cual se selecciona una parte de los individuos para que pasen a la siguiente generación y se reproduzcan, creando una descendencia que completará la siguiente generación. Los individuos con un mejor *fitness* tienen una mayor probabilidad de ser seleccionados. Sin embargo, esto no implica que aquellos individuos con un rendimiento inferior carezcan de posibilidades. En la naturaleza, los organismos que exhiben la mayor capacidad de adaptación tienen una mayor probabilidad de reproducirse. Sin embargo, esto no implica que los demás organismos carezcan de oportunidades. En el AG esto contribuye a preservar la variabilidad genética y evitar el estancamiento de las soluciones.

Existen diversos métodos de selección, entre los cuales se encuentra: torneo, rango, Boltzmann y SUS.¹¹ El método de selección empleado en el Mulo es la **ruleta elitista**. Este método constituye una modificación del método de la ruleta, el cual se explicará a continuación.

Ruleta

La ruleta es una técnica de selección fundamentada en la probabilidad. Por lo tanto, cuanto mejor sea la solución, mayores serán las probabilidades de que sea seleccionada. Por el contrario, las soluciones que presenten un rendimiento deficiente contarán con menos probabilidades de ser seleccionadas. Podemos establecer una analogía con la ruleta de un casino: a mejor *fitness*, mayor será la porción de ruleta y, por ende, mayores serán las posibilidades de ser seleccionada. En la Figura 3.3 se representa de forma ilustrativa el método de la ruleta.

En cada giro de la ruleta, un individuo es seleccionado y posteriormente removido de la población, con el objetivo de evitar seleccionar un mismo organismo más de una vez. Una variación del método de la ruleta es la ruleta elitista.

¹¹Stochastic Universal Sampling

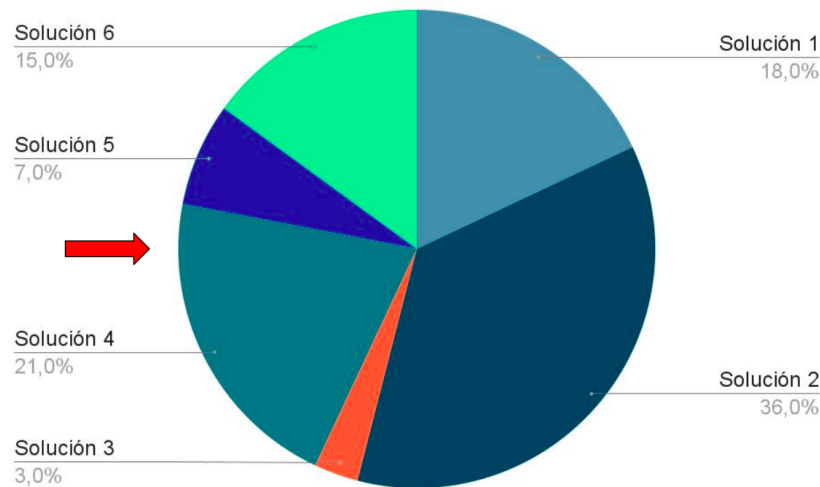


Figura 3.3: Ejemplo del método de la ruleta, la flecha roja funciona como el punto de selección. Si bien la solución 2 tiene mayor porcentaje de ser elegida (36 %), no descarta que la solución 3 (3 %) pueda ser seleccionada.

Ruleta elitista

El método de la ruleta, si bien otorga una mayor ventaja de selección a los individuos con mejor fitness, no excluye la posibilidad de que los mejores individuos sean descartados y con ello sus soluciones descartadas. Para evitar esto, se implementa el **elitismo**, mediante el cual un porcentaje de las mejores soluciones es transferido directamente a la siguiente generación. En el Mulo, el 50 % de la población es seleccionada de la siguiente manera: el 10 % de las mejores soluciones es elegido mediante un proceso de elitismo, mientras que el 40 % restante es seleccionado a través de la ruleta convencional.

3.1.4. Cruzamiento

El cruzamiento, también denominado recombinación, es el equivalente a la reproducción en nuestra analogía de la evolución, en la que se forman dos individuos nuevos a partir de una pareja de progenitores que transmiten características de sus genes. Este fenómeno da lugar a descendientes mejor adaptados al medio, o en este caso, a soluciones más óptimas al problema en cuestión. Los individuos generados por la recombinación constituyen el 50 % de los individuos descartados en el proceso de selección, manteniendo así la población en cada generación. En el Mulo se han programado dos métodos de cruce: la recombinación

Recombinación aritmética

La recombinación aritmética propuesta por Michalewicz [4] consiste en una combinación lineal de dos padres mediante la siguiente formulación

$$\begin{aligned} \text{sucesor}_1 &= a(\text{progenitor}_1) + (1 - a)\text{progenitor}_2, \\ \text{sucesor}_2 &= a(\text{progenitor}_2) + (1 - a)\text{progenitor}_1, \end{aligned} \tag{3.5}$$

donde a es un número aleatorio distribuido uniformemente en el intervalo de $(0,1)$. Considere dos padres cuyo ADN se compone de 4 genes, como sigue

$$\begin{aligned} \text{progenitor}_1 &= \begin{matrix} 2,75 & 0,73 & 0,65 & 1,5 \end{matrix} \\ \text{progenitor}_2 &= \begin{matrix} 0,48 & 4,78 & 0,15 & 0,02 \end{matrix} \end{aligned}$$

aplicando la Ec. (3.5) y un valor $a = 0,35$, los genes de los descendientes serían

$$\begin{aligned} \text{sucesor}_1 &= \begin{matrix} 1,2745 & 3,3625 & 0,325 & 0,538 \end{matrix} \\ \text{sucesor}_2 &= \begin{matrix} 1,9555 & 2,1475 & 0,475 & 0,982 \end{matrix} \end{aligned}$$

SBX (*Simulated Binary Crossover*)

Este método de cruzamiento propuesto en Deb, Agrawal et al. [5] tiene como objetivo imitar el cruzamiento de punto único que se da en AGs que se encuentran programados de forma binaria. La Figura 3.4 ilustra el funcionamiento del método de punto único.

Al emplear el método SBX, los descendientes se crean mediante la siguiente fórmula

$$\begin{aligned} \text{sucesor}_1 &= \frac{1}{2}[(1 + \beta)\text{progenitor}_1 + (1 - \beta)\text{progenitor}_2] \\ \text{sucesor}_2 &= \frac{1}{2}[(1 - \beta)\text{progenitor}_1 + (1 + \beta)\text{progenitor}_2] \end{aligned} \tag{3.6}$$

ⁱⁱⁱ*Simulated Binary Crossover*

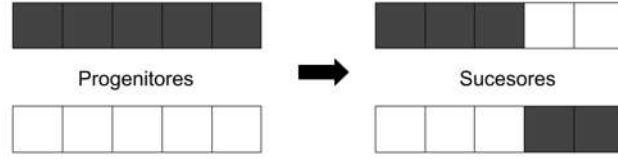


Figura 3.4: Cruzamiento punto único. La cadena de ADN se corta en un punto aleatorio para ambos padres y los descendientes son formados a partir de las subcadenas de ADN resultantes.

donde β es el factor de dispersión que se calcula como sigue

$$\beta(\eta) = \begin{cases} 2u^{\frac{1}{(\eta+1)}} & \text{si } u \leq 0.5, \\ \left[\frac{1}{2(1-u)} \right]^{\frac{1}{(\eta+1)}} & \text{si } u > 0.5, \end{cases} \quad (3.7)$$

donde u es un valor aleatorio con distribución uniforme en un intervalo de $(0,1)$, mientras que η es un parámetro que representa el índice de distribución. Cuanto mayor es el valor de η más cercanos serán los valores de los genes entre padres e hijos. Veamos lo anterior con un ejemplo, siendo dos padres con un ADN compuesto de tres genes

$$\begin{aligned} \text{progenitor}_1 &= \begin{matrix} 1,56 & 0,35 & 2,41 \end{matrix} \\ \text{progenitor}_2 &= \begin{matrix} 4,51 & 3,52 & 0,81 \end{matrix} \end{aligned}$$

eligiendo dos conjuntos de valores podemos poner de manera visual el funcionamiento del método SBX.

- Caso 1: Con $\eta_1 = 3$ y $u_1 = 0,15$, se obtiene el valor, $\beta_1 = 0,74$. Resultando en

$$\begin{aligned} \text{sucesor}_1 &= \begin{matrix} 1,9435 & 0,7621 & 2,202 \end{matrix} \\ \text{sucesor}_2 &= \begin{matrix} 4,1265 & 3,1079 & 1,018 \end{matrix} \end{aligned}$$

- Caso 2: Con $\eta_2 = 10$ y $u_2 = 0,6$ se obtiene, $\beta_2 = 1,0205$. De aquí los descendientes

$$\text{sucesor}_1 = \begin{matrix} 1,53 & 0,3175 & 2,4264 \end{matrix}$$

$$\text{sucesor}_2 = \begin{matrix} 4,54 & 3,5525 & 0,7936 \end{matrix}$$

Se puede observar que efectivamente con valor elevado de η los genes de la descendencia son muy parecidos a los de sus progenitores. En el Mulo se emplean valores de $\eta < 5$, esto para lograr una exploración mas amplia del espacio de parámetros y con ello encontrar a la mejor solución posible.

3.1.5. Mutación

El propósito del proceso de mutación es alterar aleatoriamente el ADN de los individuos para explorar nuevas regiones en el espacio de parámetros. En la naturaleza, estas mutaciones aleatorias pueden proporcionar ventajas adaptativas a los organismos. Un caso es el del oso polar, cuyo pelaje blanco surgió de una mutación a partir de un ancestro de pelaje pardo. Esta adaptación les otorgó un camuflaje ideal en la nieve, facilitándoles la caza y dando una mayor ventaja reproductiva. Como resultado, esta ventaja se propagó con el pasar de las generaciones, permitiendo que esta población desplazara progresivamente a la de los osos pardos.

Existe una gran diversidad de métodos de mutación que pueden ser implementados en los AGs para imitar el proceso de mutación, en el Mulo se encuentran implementados dos: mutación uniforme y una variante del método de mutación no uniforme. En todos los casos la mutación afecta a la descendencia recién formada.

Mutación Uniforme

La mutación uniforme [6], funciona como sigue. Se procede a la selección de dos hijos y se elige al azar un gen de una cadena de ADN de uno de los hijos, pasando a un nuevo individuo sin modificaciones. El gen que no ha sido objeto de selección es transferido a la cadena de un segundo individuo. Este proceso se repite a lo largo de toda la cadena de ADN.

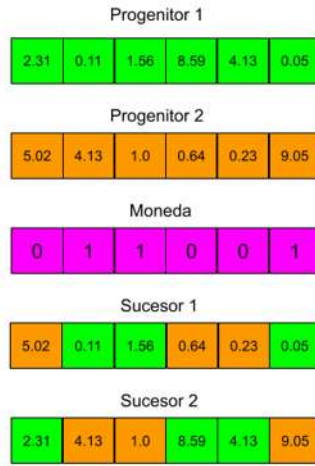


Figura 3.5: Esquema de la mutación uniforme. Donde los números 0 y 1 representan las dos caras de la moneda.

Este procedimiento es análogo a la acción de lanzar una moneda: si el resultado es «cara», el gen del hijo se transmite al primer individuo; si es «cruz», el gen se transmite al segundo individuo. En la Figura 3.5 se muestra de manera visual el proceso de mutación uniforme.

Mutación No-Uniforme

En el Mulo se usa una variante de la mutación no-uniforme descrita por Neubauer [7]

$$v'_k = \begin{cases} v_k + \Delta(g, UB - v_k) & \text{si } u = 0, \\ v_k - \Delta(g, v_k - LB) & \text{si } u = 1, \end{cases} \quad (3.8)$$

donde v'_k y v_k son el gen mutado y el gen original respectivamente, LB y UB son los límites inferior y superior del dominio para v_k y u es un número binario aleatorio. La función $\Delta(g, y)$ devuelve un valor en el intervalo $(0, y)$, dependiente de la generación g . Siendo esta función

$$\Delta(g, y) = y \left(1 - r^{\left(1 - \frac{g}{G_{\max}}\right)^b} \right) \quad (3.9)$$

donde r es un número aleatorio entre $(0,1)$, $G_{\max}$ es el número total de generaciones y b es un parámetro que determina el grado de dependencia en cada iteración.

Esta formulación considera el rango de los genes. Sin embargo, es importante tener en cuenta que en ocasiones puede no estar claro dentro de qué rango se encuentran los valores

de cada parámetro. En el Mulo implementamos la siguiente modificación a la formulación de la mutación no-uniforme.

$$v'_k = \begin{cases} v_k + \Delta(g, y) & \text{si } u \leq 0.5, \\ v_k - \Delta(g, y) & \text{si } u > 0.5, \end{cases} \quad (3.10)$$

donde

$$\Delta(g, y) = y \left[1 - r \left(1 - \frac{g}{G_{\max}} \right)^b \right]. \quad (3.11)$$

Con la presente modificación, se prescinde del uso de los valores límite de los genes. En todos los casos, el valor de $y = 0,5$, mientras que el valor de b es diferente en cada simulación.

3.2. Ventajas de los algoritmos genéticos

La representación de los AGs, fundamentada en la teoría de la evolución, les confiere una serie de ventajas a la hora de resolver el problema de la estimación de parámetros. A continuación, se presentan algunas de las ventajas más destacadas:

1. Los AG tienden a encontrar el mínimo global debido a la combinación de los operadores de cruce y mutación. Esta combinación tiene la capacidad de mantener la diversidad dentro de la población y evitar que se queden estancados en mínimos locales (véase la Figura 3.6). Esto se traduce en que tienen soluciones diferenciadas en sus genes y cubren una mayor área de búsqueda.
2. Los AGs, al requerir únicamente el valor de la función de fortaleza, son aplicables a funciones matemáticas complejas o de difícil derivación. Esta característica resulta de particular utilidad en el contexto de funciones que presentan una elevada cantidad de parámetros, situación en la que otras metodologías de optimización comúnmente presentan dificultades. Los AGs exhiben una gestión más eficiente de este problema.
3. Los AG tienen la capacidad de ser paralelizados, lo que implica la utilización de los núcleos del ordenador para que las etapas operen de manera simultánea. Por ejemplo, es posible llevar a cabo la división de la creación y evaluación de la población, almacenarla

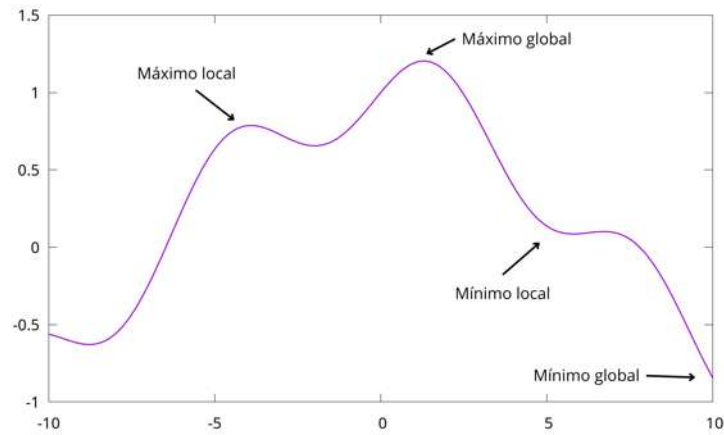


Figura 3.6: Representación de mínimos y máximos en una función.

en una memoria común o intercambiar organismos entre núcleos. Cada núcleo tiene la capacidad de contar con un operador distinto de recombinación y mutación. Esta característica permite que la búsqueda de soluciones sea más eficiente.

4. Existen problemas en los que, para parámetros similares, los valores de salida son distintos en cada medición. Cuando esto ocurre, se dice que el problema tiene ruido. Este comportamiento se sortea mediante la constante evaluación y formación de nuevos individuos por parte de los AG.

Habiendo mencionado algunas de las ventajas, revisemos las limitaciones de los algoritmos genéticos.

3.3. Limitaciones de los algoritmos genéticos

No existe el método perfecto, todos poseen limitaciones y los algoritmos genéticos no son la excepción, dicho esto, estas son algunas de las limitaciones asociadas a los AGs:

1. Si bien los conceptos de recombinación, mutación y *fitness* son de fácil comprensión, su implementación puede resultar desafiante y consumir mucho tiempo. En algunas ocasiones, la implementación de los AG puede llegar a convertirse en un proceso artístico, ya que, en caso de no llevarse a cabo de manera correcta, estos pueden llegar a converger en soluciones que no son óptimas.

2. El hecho de que se emplee una cantidad numerosa de población y/o de generaciones implica que todo el proceso iterativo sea computacionalmente costoso hasta alcanzar una solución satisfactoria.
3. Si el *fitness* de un individuo es mucho mejor que el del resto de la población puede provocar que se replique de manera abarque a toda la población, estancando la solución en un mínimo local. A este fenómeno se le conoce como **convergencia prematura**.
4. No se puede garantizar el hallazgo del mínimo global mediante el uso de AGs, y esto es aplicable a todos los métodos de optimización.

Es posible mitigar las limitaciones mencionadas mediante una cuidadosa selección de la población, las generaciones y los métodos de cruce y mutación. Esta funcionalidad puede integrarse con la paralelización para reducir el tiempo de procesamiento.

3.4. Validación del algoritmo genético

Una vez se ha descrito el funcionamiento del Mulo, es necesario evaluar su capacidad para resolver el problema de la estimación de parámetros. Para ello, se replicarán los resultados presentados en trabajos previos y se evaluarán las soluciones encontradas por el Mulo en comparación con las reportadas, centrándonos únicamente en modelos matemáticos basados en EDOs. Para ello, se empleará la métrica de error SSE (*Sum of Squared Errors*, por sus siglas en inglés), que se expresa de la siguiente manera

$$\text{SSE} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (3.12)$$

donde, y_i representan los datos experimentales y $\hat{y}_i$, sus correspondientes valores estimados. Esta métrica nos permite conocer la dispersión de los datos generados con respecto a los observacionales, por lo que, mientras menor sea el valor de SSE, mejor será el ajuste proporcionado por el conjunto de parámetros.

Cuadro 3.1: Datos del problema *Influenza in a boarding school*.

t	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
I(t)	1	3	6	25	73	222	294	258	237	191	125	69	27	11	4

3.4.1. Modelo SIR

El primer problema que se evaluará es un modelo SIR, aplicado al problema *Influenza in a boarding school*, reportado por J. D. Murray [8]. En este caso, se trata de un brote de gripe ocurrido en enero de 1978 en un internado inglés. El brote comenzó cuando 763 estudiantes regresaron de las vacaciones de invierno. En la Tabla 3.1 se encuentran los datos de la evolución en la cantidad de niños infectados.

El modelo SIR consiste en tres EDO no lineales acopladas. Se trata de un modelo básico de enfermedades infecciosas que, no obstante, permite extraer información útil para las políticas sanitarias. El modelo se basa en separar a la población en tres grupos: los **S**usceptibles, los **I**nfectados y los **R**emovidos, de las iniciales de estos términos es de donde el modelo adquiere su nombre. El sistema de ecuaciones es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 \frac{dS}{dt} &= -aSI, \\
 \frac{dI}{dt} &= aSI - bI, \\
 \frac{dR}{dt} &= bI,
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

donde a es la tasa de transmisión y b es la tasa de recuperación. Para solucionar este problema, se generó una población de 200 individuos a lo largo de 1000 generaciones. La función de fortaleza empleada fue MAE durante todas las generaciones, con SBX ($\eta = 4$) como método de cruzamiento y mutación no-uniforme ($b = 5$). En lo que respecta al método numérico, el tamaño de paso es $h = \frac{1}{300}$.

Además de los valores para a y b que reporta Murray, Esquivel et al. [9] crearon su propio algoritmo genético para resolver este mismo problema. En la Tabla 3.2 se encuentran los pares de datos así como el valor de SSE que se obtiene con cada solución. La solución obtenida con el Mulo es prácticamente idéntica a la reportada por Murray, lo que se refleja en

Cuadro 3.2: Comparación de los parámetros obtenidos con el Mulo que dan solución a la Ec. (3.13) con trabajos previos.

Modelo	$a \times 10^{-3}$	b	SSE
Murray	2.1800	0.44850	4526
Esquivel	2.0500	0.43552	10644
Mulo	2.1782	0.44306	4514

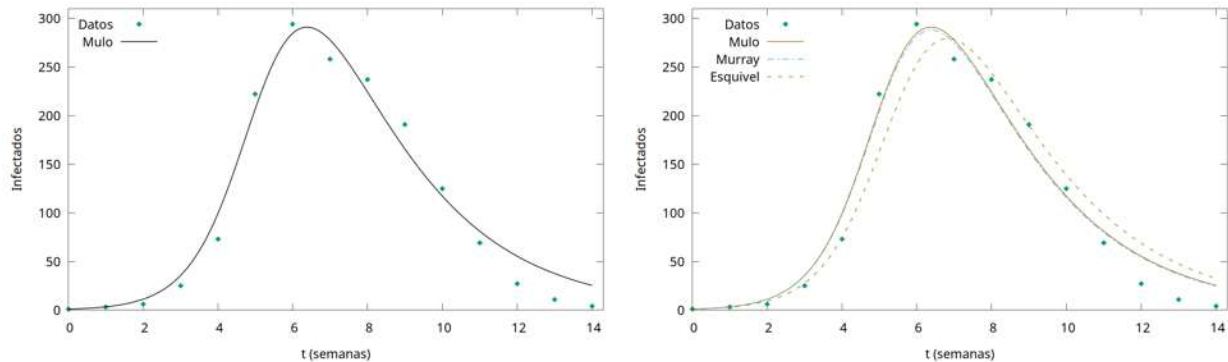


Figura 3.7: Solución al problema *Influenza in a boarding school* reportado por Murray [8]. A la izquierda el mejor individuo obtenido con el Mulo. A la derecha comparación de la solución generada por el Mulo con la reportada en otros estudios. Las condiciones iniciales de la Ec. (3.13) son: $S_0 = 762$, $I_0 = 1$ y $R_0 = 0$.

el valor SSE siendo muy similar. Por otra parte, si bien el valor de b reportado por Esquivel es consistente con el de Murray, el parámetro a presenta una variación considerable, lo cual impacta en el valor SSE, el cual es mayor al doble del obtenido por Murray y por el Mulo. La Figura 3.7 ilustra la comparación entre las soluciones de cada estudio.

Este primer problema es relativamente sencillo, ya que solo es necesario estimar dos parámetros. Sin embargo, es un buen punto de partida para evaluar las capacidades del Mulo en la búsqueda de parámetros.

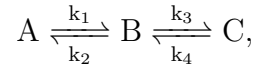
3.4.2. Reacción de primer orden reversible

Los dos problemas siguientes han sido propuestos por Esposito y Floudas [10]. El primer modelo que se procederá a replicar es el de una reacción reversible de primer orden. Una reacción de primer orden es una reacción química cuya velocidad de reacción depende únicamente de una sola especie. Por otra parte, una reacción reversible es aquella en la que pueden ocurrir de reactivos a productos, y viceversa. Estas reacciones se representan con una doble

Cuadro 3.3: Datos para la reacción reversible correspondiente con la Ec. (3.14).

μ	1	2	3	4	5	6	7
t_μ	0.05	0.1	0.15	0.2	0.25	0.3	0.35
$x_{\mu,1}$	0.8241	0.6852	0.5747	0.4867	0.4166	0.3608	0.3164
$x_{\mu,2}$	0.0937	0.1345	0.1654	0.1899	0.2094	0.2249	0.2373
$x_{\mu,3}$	0.0821	0.1802	0.2598	0.3233	0.3738	0.4141	0.4461
μ	8	9	10	11	12	13	14
t_μ	0.4	0.45	0.5	0.55	0.6	0.65	0.7
$x_{\mu,1}$	0.2810	0.2529	0.2304	0.2126	0.1984	0.1870	0.1870
$x_{\mu,2}$	0.2472	0.2550	0.2613	0.2662	0.2702	0.2733	0.2759
$x_{\mu,3}$	0.4717	0.4920	0.5082	0.5210	0.5313	0.5395	0.5460
μ	15	16	17	18	19	20	
t_μ	0.75	0.8	0.85	0.9	0.95	1.0	
$x_{\mu,1}$	0.1709	0.1651	0.1606	0.1570	0.1541	0.1518	
$x_{\mu,2}$	0.2779	0.2794	0.2807	0.2817	0.2825	0.2832	
$x_{\mu,3}$	0.5511	0.5553	0.5585	0.5612	0.5632	0.5649	

flecha. Las reacciones de este problema son las siguientes



Este modelo químico aparece en [11], donde las reacciones anterior se representan matemáticamente como sigue

$$\begin{aligned} \frac{dz_1}{dt} &= -\theta_1 z_1 + \theta_2 z_2, \\ \frac{dz_2}{dt} &= \theta_1 z_1 - (\theta_2 + \theta_3) z_2 + \theta_4 z_3, \\ \frac{dz_3}{dt} &= \theta_2 z_2 - \theta_4 z_3, \end{aligned} \tag{3.14}$$

donde z_1 , z_2 y z_3 son las fracciones molares de los compuestos A, B y C, respectivamente. Los parámetros θ_1 y θ_2 corresponden a las constantes de reacción de reactivos a productos, mientras que θ_3 y θ_4 son las constantes de reacción de productos a reactivos. Los valores de los parámetros θ están restringidos al siguiente intervalo

$$(0, 0, 0, 0) \leq \theta \leq (10, 10, 50, 50).$$

este problema requiere la búsqueda de cuatro parámetros y ahora tenemos datos para las tres variables z . En la Tabla 3.3 se muestran los datos reportados para los tres compuestos, reportados por Floudas et al. [12].

Cuadro 3.4: Comparativa de valores para los parámetros que dan solución a la Ec. (3.14) reportados por estudios previos junto con los obtenidos con el Mulo.

Modelo	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	SSE
Esposito	4.0	2.0	40.013	20.007	0.1303
Katare	3.9813	1.9759	39.787	19.887	0.1320
Mulo	5.56968	3.466	37.56777	18.68911	0.0678

Para resolver el modelo en cuestión, se implementó una población de 200 individuos a lo largo de 2000 generaciones. La obtención de los parámetros se llevó a cabo utilizando el operador de cruzamiento SBX ($\eta = 2$) y mutación uniforme. Teniendo en cuenta que este modelo considera un total de tres variables, cada una de las cuales cuenta con datos experimentales reportados, la función de fortaleza RMSE se aplica de forma promediada, tal y como sigue

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{M} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N (y_{i,j} - \hat{y}_{i,j})^2}, \quad (3.15)$$

donde M representa la cantidad de variables del modelo; en este caso, $M = 3$, mientras que N, representa la cantidad de datos experimentales.

Además de realizar una comparación entre los parámetros reportados por Esposito y Floudas [10], se contrastan los valores obtenidos con el Mulo con los del trabajo de Katare et al. [13], en el que se desarrolló un AG con una metodología híbrida en la que los mejores organismos de una generación se utilizan como valores iniciales para la siguiente. En la Tabla 3.4, se presenta una comparativa de los valores obtenidos con el Mulo y los reportados en los dos estudios mencionados.

El valor de SSE obtenido con el Mulo resulta ser la mitad del reportado en los dos estudios previos. Al analizar los parámetros, se observan diferencias significativas únicamente en θ_1 y θ_2 . De hecho, si el valor de θ_2 obtenido con el Mulo se reduce en un 60 %, el SSE de la solución pasa de 0,0678 a 0,1358, acercándose notablemente a los valores obtenidos por las dos soluciones comparativas. La Figura 3.8 muestra una comparación gráfica de las soluciones generadas por los tres modelos.

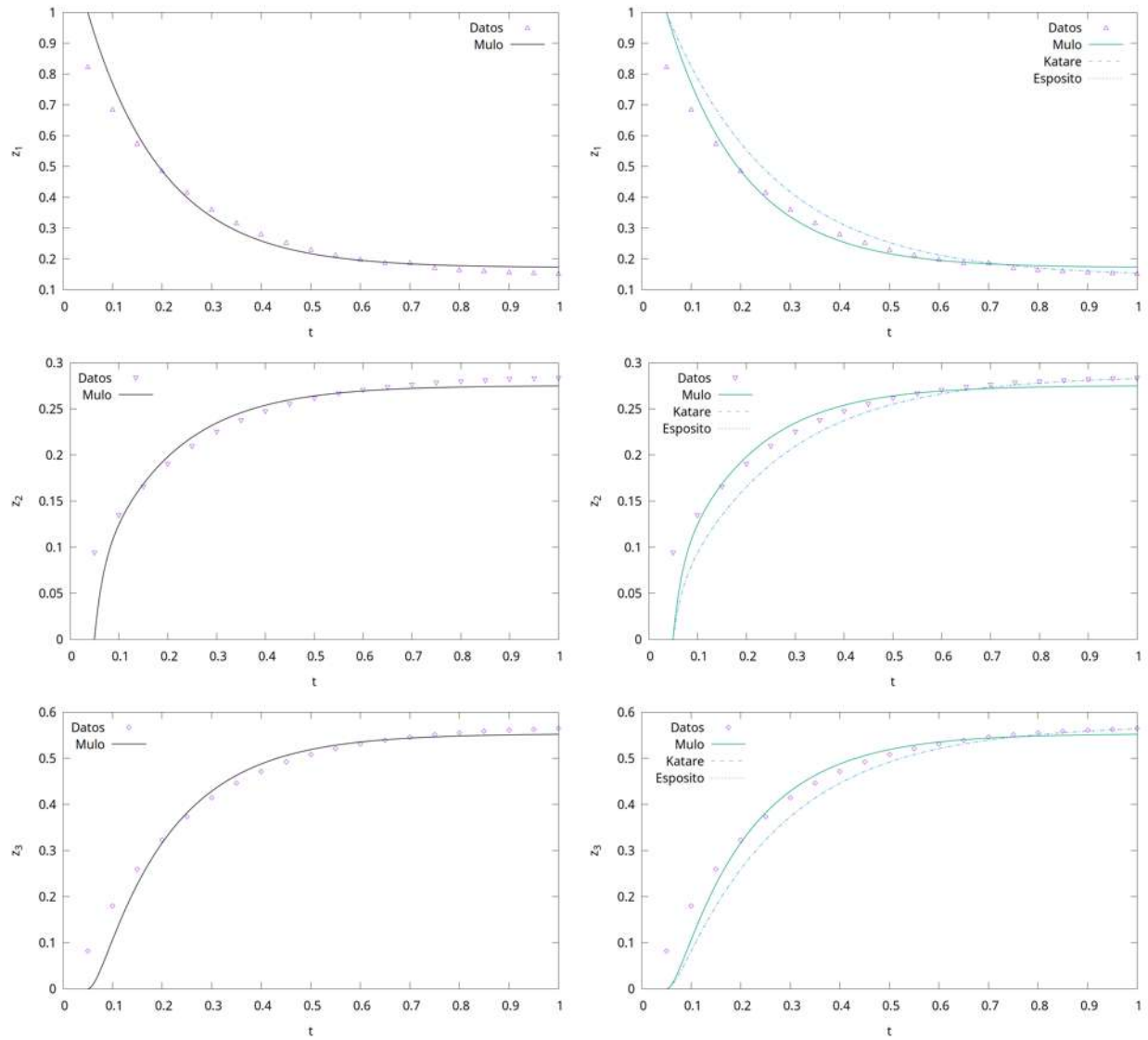


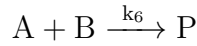
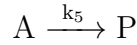
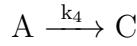
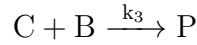
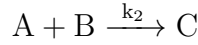
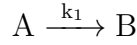
Figura 3.8: Solución del Modelo (3.14), con los valores reportados en la Tabla 3.4. El panel izquierdo muestra la solución individual obtenida con el Mulo para cada variable, mientras que a la derecha se encuentra la comparación de las tres soluciones, para cada variable.

3.4.3. Proceso de conversión Metanol-Hidrocarburos

Este modelo representa la conversión de metanol a ciertos hidrocarburos [14]. Un modelo cinético simple de este proceso es el siguiente:

Cuadro 3.5: Datos del proceso Metanol-Hidrocarburos correspondiente con la Ec. (3.16).

μ	1	2	3	4	5	6	7	8
t_μ	0.05	0.065	0.080	0.123	0.233	0.273	0.354	0.397
$x_{\mu,1}$	0.461	0.426	0.383	0.305	0.195	0.170	0.139	0.112
$x_{\mu,2}$	0.114	0.135	0.157	0.194	0.231	0.234	0.228	0.228
$x_{\mu,3}$	0.018	0.035	0.045	0.047	0.084	0.095	0.111	0.134
μ	9	10	11	12	13	14	15	16
t_μ	0.418	0.502	0.553	0.681	0.75	0.916	0.937	1.112
$x_{\mu,1}$	0.112	0.090	0.082	0.066	0.053	0.043	0.041	0.029
$x_{\mu,2}$	0.226	0.220	0.214	0.178	0.188	0.183	0.184	0.166
$x_{\mu,3}$	0.168	0.148	0.157	0.206	0.206	0.214	0.213	0.23



donde A representa óxidos, $B = \ddot{C}H_2$, C son olefinas, finalmente P denota parafinas y otros compuestos aromáticos. Este modelo cinético se representa con el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\begin{aligned}
 \frac{dz_1}{dt} &= - \left(2\theta_1 - \frac{\theta_1 z_2}{(\theta_2 + \theta_5)z_1 + z_2} + \theta_3 + \theta_4 \right) z_1 \\
 \frac{dz_2}{dt} &= \frac{\theta_1 z_1 (\theta_2 z_1 - z_2)}{(\theta_2 + \theta_5)z_1 + z_2} + \theta_3 z_1 \\
 \frac{dz_3}{dt} &= \frac{\theta_1 z_1 (z_2 + \theta_2 z_1)}{(\theta_2 + \theta_5)z_1 + z_2} + \theta_4 z_1
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

Los datos para este modelo provienen de [12] y se muestran en la Tabla 3.5. En este modelo tenemos datos para las tres variables de estado, además de una restricción para los parámetros. Dicha restricción es la siguiente: $0,1 \leq \theta_2 + \theta_5$.

El fue resuelto mediante empleando una población de 200 individuos y el método de

Cuadro 3.6: Comparación de parámetros para el modelo de conversión metanol-hidrocarburos correspondiente con la Ec. (3.16).

Método	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5	SSE
Esposito	5.1981	1.2112	0	0	0	0.69409
Katare	5.2212	1.2320	0	0	0.004665	0.69284
Mulo	3.95494	1.1066	-0.03427	0.03127	0.02204	0.62455

recombinación aritmética. En lo que respecta al método de mutación, se implementó la mutación no-uniforme ($b = 20$) durante un total de 2000 generaciones. En lo que se refiere a la función de fortaleza, se ha recurrido al uso de la función RMSE promediada, que ya fue empleada en el problema anterior.

Al igual que el problema anterior, se hace la comparación de los valores obtenidos con el Mulo con los trabajos de Esposito y Floudas [10] y Katare et al. [13]. En la Tabla 3.6 se encuentran los valores reportados junto a los obtenidos con el Mulo. Los parametros reportados así como los obtenidos en este trabajo cumplen con la restricción impuesta a este modelo.

Algo que llama particularmente la atención al examinar los valores de la Tabla 3.6 es el signo negativo del parámetro θ_3 obtenido con el Mulo. Este resultado no constituye un error. Para comprenderlo, veamos la definición del vector de parámetros θ reportada por Floudas et al. [12]

$$\theta \equiv \left(k_1, \frac{k_2}{k_3}, k_4, k_5, \frac{k_6}{k_3} \right), \quad (3.17)$$

a partir de esta definición se observa que $\theta_3 = k_4$. Dado que los parámetros k_i representan constantes de velocidad de reacción, el signo de k_4 indica la dirección de la reacción. Un valor negativo implica que la reacción considerada ocurre en sentido inverso; es decir, el reacción $A \longrightarrow C$ se da como $C \longrightarrow A$. Este resultado se deriva directamente del ajuste obtenido y, aunque es consistente desde el punto de vista matemático, no puede descartarse que dicha interpretación no sea físicamente aplicable al proceso real.

El valor de SSE derivado del ajuste obtenido es menor en comparación con los estudios de referencia. Esto se ve reflejado en la Figura 3.9, la cual que muestra el comportamiento de los ajustes propuestos junto a los datos observacionales.

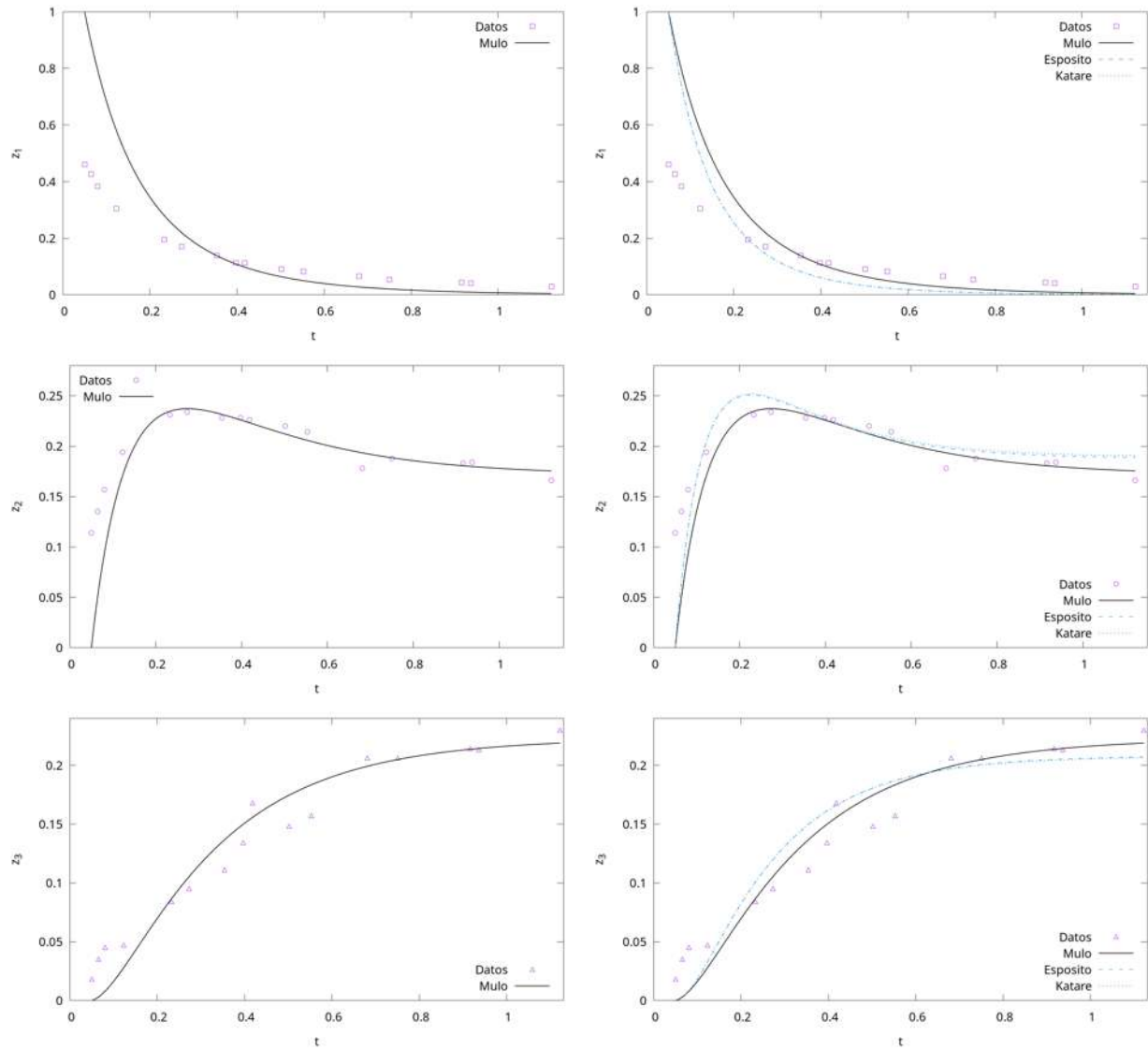


Figura 3.9: Solución del Modelo (3.16), con los valores reportados en la Tabla 3.6. El panel izquierdo muestra la solución individual obtenida con el Mulo para cada variable, mientras que a la derecha se encuentra la comparación de las tres soluciones, para cada variable.

3.4.4. Difusión de enzimas

El último problema a evaluar es uno relacionado con la difusión de enzimas dentro y fuera del corazón después de un infarto, el modelo es el siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= p_1(27,8 - y_1) + \frac{p_4}{2,6}(y_2 - y_1) + \frac{4991}{t\sqrt{2\pi}} \exp \left[-0,5 \left(\frac{\ln(t) - p_2}{p_3} \right)^2 \right], \\ \frac{dy_2}{dt} &= \frac{p_4}{2,7}(y_1 - y_2), \end{aligned} \quad (3.18)$$

el modelo requiere estimar los parámetros p_1, p_2, p_3, p_4 , así como las condiciones iniciales.

Cuadro 3.7: Datos para el problema de difusión de enzimas correspondiente con la Ec. (3.18).

t	y_1	t	y_1	t	y_1	t	y_1
0.1	27.8	21.3	331.9	42.4	62.3	81.1	23.5
2.5	20	22.9	243.5	44.4	58.7	91.1	24.8
3.8	23.5	24.9	212.0	47.9	41.9	101.9	26.1
7.0	63.6	26.8	164.1	53.1	40.2	115.4	33.3
10.9	267.5	30.1	112.7	59.0	31.3	138.7	17.8
15.0	427.8	34.1	88.1	65.1	30.0	163.2	16.8
18.2	339.7	37.8	76.2	73.1	30.6	186.7	16.8

Cuadro 3.8: Comparación de parámetros reportados para el problema de difusión de enzimas.

Modelo	p_1	p_2	p_3	p_4	$y_1(0,1)$	$y_2(0,1)$	SSE
Nyarko	0.28452	2.67169	0.39268	0.16144	23.99	40.14	4641
Khalik	0.2619	2.6336	0.3524	0.2575	21.986	38.704	4130
Tutkun	0.2624	2.6378	0.3599	0.2212	28.5443	0.2329	4048
Mulo	0.29226	2.67471	0.3844	0.19755	20.57596	46.53077	4470

Los datos correspondientes a este modelo provienen de Scitovski y Jukić [15] y se encuentran en la Tabla 3.7. Para este modelo, comparamos la solución obtenida con el Mulo con la mejor solución reportada en tres trabajos previos. Estos trabajos son: Nyarko y Scitovski [16], Khalik et al. [17] y Tutkun [18]. En cada uno de estos estudios se programó un AG con especificaciones distintas, que pueden consultarse en la fuente original.

Al no haber valores para y_2 , la solución de esta variable será numérica. Para resolver el modelo correspondiente a la Ec. (3.18), la población fue de 200 individuos durante 4000 generaciones. Estos individuos se evaluaron empleando dos funciones de fortaleza: sMAPE durante las primeras 2000 generaciones y RMSE en el resto. El método de cruzamiento empleado fue SBX ($\eta = 2$) en conjunto con mutación uniforme. En la Tabla 3.8 se muestran los parámetros obtenidos, así como los de los trabajos previos.

Al observar los valores SSE, se puede ver que la solución obtenida con el Mulo no es la mejor, a pesar de que los parámetros estimados son similares a los de los trabajos previos, con una excepción notable en el parámetro p_4 , que es similar al reportado por Nyarko y Scitovski. Esta solución es la más cercana a la del Mulo en lo que a SSE se refiere. Las diferencias en la condición inicial para y_2 no indican un mal desempeño, ya que el valor que reporta Nyarko es similar al que reporta Khalik. Además, estas dos soluciones solo difieren en el parámetro p_4 . La Figura 3.10 muestra la comparativa de las soluciones con los datos

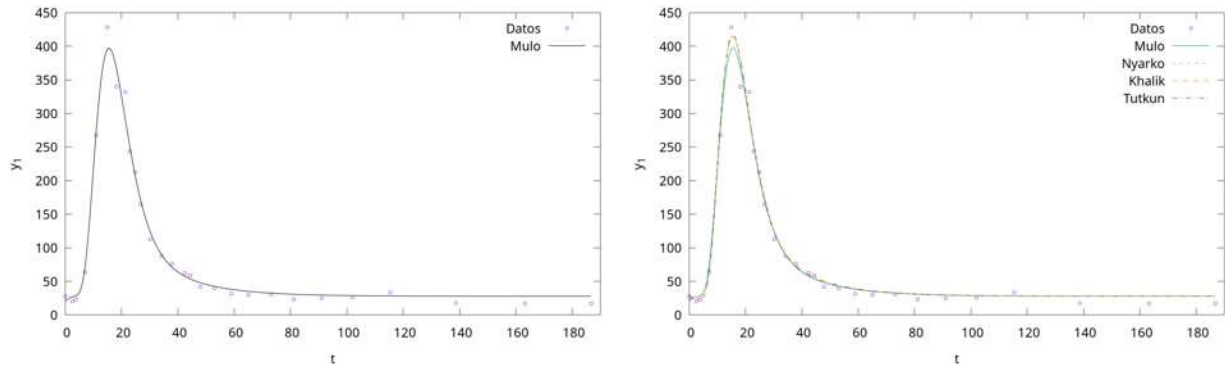


Figura 3.10: Izq.: mejor individuo obtenido con el AG. Der.: comparación de la solución generada con los parámetros de otros tres trabajos previos.

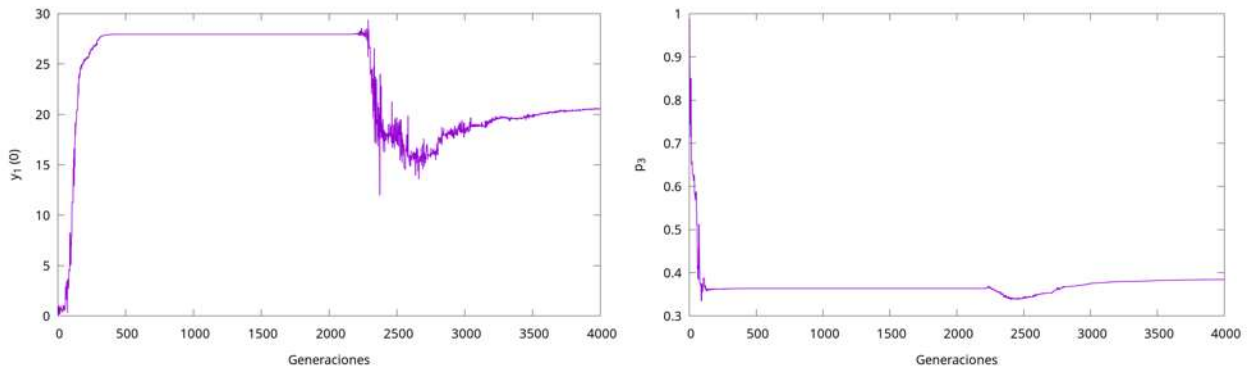


Figura 3.11: Evolución de valores seleccionados de la Ec. (3.18). A la izquierda el cambio de la condición inicial $y_1(0)$. A la derecha el cambio en el parámetro p_3 . Se observan cambios a partir de las 2000 generaciones, coincidiendo con el cambio de función de fortaleza.

reportados.

Como se evidencia en la Figura 3.11, la solución obtenida por el Mulo no es la más óptima. Se han identificado dos áreas de discrepancia: una al inicio del tiempo y otra en el tiempo cercano a 20, en el valor máximo de la concentración de enzimas.

Tal y como se mencionó en la Sección 3.1.2, la combinación de funciones de fortaleza afecta a las condiciones iniciales y/o al resto de parámetros. En la Figura 3.11 se muestra el cambio de dos parámetros: $y_1(0)$ y p_3 . Es evidente que el valor de la condición inicial experimenta cambios después de 2000 generaciones, coincidiendo con la modificación de la función de fortaleza. Por otro lado, el parámetro p_3 no muestra alteraciones significativas.

Una vez completada la validación del algoritmo genético, estamos en condiciones de iniciar el modelado del calentamiento global. En el capítulo siguiente se abordará la aplicación de todo lo previamente deducido, con el objetivo de evaluar el alcance de este fenómeno.

Bibliografía

- [1] David E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. 1st. USA: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1989. ISBN: 0201157675.
- [2] Isaac Asimov. *Fundación e Imperio*. Gnome Press, 1952. ISBN: 8497595017.
- [3] Eyal Wirsansky. *Hands-On Genetic Algorithms with Python: Applying genetic algorithms to solve real-world deep learning and artificial intelligence problems*. Packt Publishing, 2020. ISBN: 9781838559182.
- [4] Z. Michalewicz. *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs*. Artificial intelligence. Springer, 1996. ISBN: 9783540606765.
- [5] Kalyanmoy Deb, Ram Bhushan Agrawal et al. «Simulated binary crossover for continuous search space». En: *Complex systems* 9.2 (1995), págs. 115-148.
- [6] M. Srinivas y L.M. Patnaik. «Adaptive probabilities of crossover and mutation in genetic algorithms». En: *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics* 24.4 (1994), págs. 656-667. DOI: [10.1109/21.286385](https://doi.org/10.1109/21.286385).
- [7] A. Neubauer. «A theoretical analysis of the non-uniform mutation operator for the modified genetic algorithm». En: *Proceedings of 1997 IEEE International Conference on Evolutionary Computation (ICEC '97)*. 1997, págs. 93-96. DOI: [10.1109/ICEC.1997.592275](https://doi.org/10.1109/ICEC.1997.592275).
- [8] James Dickson Murray. *Mathematical biology: I. An introduction*. Springer, 2002.
- [9] Ricardo Medel Esquivel et al. «The inverse problem of a dynamical system solved with genetic algorithms». En: *Journal of Physics: Conference Series* 1723.1 (ene. de 2021), pág. 012021. DOI: [10.1088/1742-6596/1723/1/012021](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1723/1/012021).
- [10] William R. Esposito y Christodoulos A. Floudas. «Global Optimization for the Parameter Estimation of Differential-Algebraic Systems». En: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 39.5 (2000), págs. 1291-1310. DOI: [10.1021/ie990486w](https://doi.org/10.1021/ie990486w).

-
- [11] Iauw Bhieng Tjoa y Lorenz T. Biegler. «Simultaneous solution and optimization strategies for parameter estimation of differential-algebraic equation systems». En: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 30.2 (1991), págs. 376-385. DOI: [10.1021/ie00050a015](https://doi.org/10.1021/ie00050a015).
- [12] Christodoulos A. Floudas et al. «Dynamic Optimization Problems». En: *Handbook of Test Problems in Local and Global Optimization*. Boston, MA: Springer US, 1999, págs. 351-412. ISBN: 978-1-4757-3040-1. DOI: [10.1007/978-1-4757-3040-1_15](https://doi.org/10.1007/978-1-4757-3040-1_15).
- [13] Santhoji Katare et al. «A hybrid genetic algorithm for efficient parameter estimation of large kinetic models». En: *Computers & Chemical Engineering* 28.12 (2004), págs. 2569-2581. ISSN: 0098-1354. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2004.07.002>.
- [14] Gheorghe Maria. «An adaptive strategy for solving kinetic model concomitant estimation — Reduction problems». En: *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 67.5 (1989), págs. 825-832. DOI: <https://doi.org/10.1002/cjce.5450670514>.
- [15] Rudolf Scitovski y Dragan Jukić. «A method for solving the parameter identification problem for ordinary differential equations of the second order». En: *Applied Mathematics and Computation* 74.2 (1996), págs. 273-291. ISSN: 0096-3003. DOI: [https://doi.org/10.1016/0096-3003\(95\)00098-4](https://doi.org/10.1016/0096-3003(95)00098-4).
- [16] Emmanuel Karlo Nyarko y Rudolf Scitovski. «Solving the parameter identification problem of mathematical models using genetic algorithms». En: *Applied Mathematics and Computation* 153.3 (2004), págs. 651-658. ISSN: 0096-3003. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0096-3003\(03\)00661-1](https://doi.org/10.1016/S0096-3003(03)00661-1).
- [17] Mostafa A. Khalik et al. «Parameter identification problem: Real-coded GA approach». En: *Applied Mathematics and Computation* 187.2 (2007), págs. 1495-1501. ISSN: 0096-3003. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.amc.2006.09.102>.
- [18] Nedim Tutkun. «Parameter estimation in mathematical models using the real coded genetic algorithms». En: *Expert Systems with Applications* 36.2, Part 2 (2009),

Capítulo 4

Modelado del calentamiento global

El calentamiento global se debe al incremento en la concentración de gases de efecto invernadero, un fenómeno que, como muchos otros en la naturaleza, puede representarse mediante un modelo matemático. Una forma de representar el modelo es mediante ecuaciones diferenciales, donde el principal problema es la estimación de parámetros, que puede solventarse mediante el uso de algoritmos genéticos. Todo lo anterior se ha tratado en detalle en cada uno de los capítulos anteriores de este trabajo de tesis; por consiguiente, ahora es el momento de aplicar todo lo aprendido en la práctica: modelar el calentamiento global mediante los cambios en las emisiones y concentraciones de los gases de efecto invernadero.

La última pieza de nuestro modelo son los datos experimentales necesarios para estimar y validar el modelo propuesto. Los datos relacionados con las emisiones de los principales GHG provienen de dos fuentes principales: fuentes fósiles y cambio de uso de suelos (LULUCF,¹ por sus siglas en inglés). En las siguientes secciones se describirán con detalle estas fuentes, así como los datos empleados en cada caso, antes de proceder al modelado.

4.1. Generalidades en los modelos

Al abordar el modelado puede ocurrir que ciertos aspectos se hayan olvidado esto debido a toda la información previa, es por esto que rescatamos los conceptos clave para el entendi-

¹*Land Use, Land Use-Change and Forestry*

miento de los aspectos de cada modelo, y en caso de profundizar de nueva cuenta en alguno poder recurrir al índice. Comenzando con la forma general de los modelos de emisiones, el oscilador armónico amortiguado y forzado

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x(t) = F(t),$$

de la forma general rescatamos que las unidades del coeficiente de amortiguamiento (γ) y de la frecuencia natural (ω_0) poseen unidades de 1/años, pudiendo así conocer la contribución de cada parámetro ya sea en crecimiento o un decaimiento, esto en concordancia con su interpretación en el ciclo dinámico de las emisiones en cuestión. Con respecto a la transformación de emisiones a concentración atmosférica de estos gases se explicará con mayor detalle en su respectiva sección. Los gases halogenados se modelarán a partir de sus concentraciones en la atmósfera.

Respecto a la estimación de parámetros, cada modelo contiene una cantidad determinada de parámetros, que denominaremos vector solución $\bar{\mathbf{u}}$. En cada caso, se especificarán claramente los parámetros que componen el vector solución. Este vector solución actúa como el ADN en el Mulo y, con ello, se busca que la solución obtenida se ajuste con el menor error posible a los datos experimentales.

En cuanto a la solución de las EDO, **el método de solución y el tamaño de paso son siempre los mismos**: la regla 3/8 del método RK4 como integrador y un tamaño de paso de $h = 0,01$. Para validar los resultados obtenidos, se utilizan varias métricas de error, cada una de las cuales es útil para determinar los errores asociados a cada modelo. Por último otra constante es el número de generaciones empleadas en cada simulación, siendo de 4000 para los modelos de emisiones y de 2000 para los modelos de concentraciones, esta elección se hace debido a que a lo largo de las pruebas se pudo constatar que el error se mantiene relativamente constante o en su defecto la disminución no es lo suficientemente considerable como para dar una mayor cantidad de tiempo de computo.

Una vez dicho lo anterior podemos comenzar con el modelado de las emisiones derivadas de fuentes fósiles.

Cuadro 4.1: Principales sectores de emisiones fósiles y los gases.

Sector	Gas
Combustión de combustibles fósiles	CO ₂ , CH ₄ , N ₂ O
Transporte	CO ₂
Emisiones fugitivas	CO ₂
Procesos industriales	CO ₂ , CH ₄ , N ₂ O
Productos minerales	CO ₂
Industria química	CO ₂
Producción de metales	CO ₂
Otras producciones	CO ₂
Solventes	CO ₂ , N ₂ O
Desechos	CO ₂ , CH ₄ , N ₂ O

4.2. Fuentes fósiles

Las emisiones derivadas de fuentes fósiles son aquellas que provienen de la quema de carbón, gas natural y petróleo, así como de otros procesos como la producción de cemento, la generación de energía, los procesos industriales, el transporte, los solventes y la gestión de residuos, en la Tabla 4.1 se resumen los sectores más importantes y los gases involucrados.

Debido a que el CO₂ es el GHG de mayor importancia, existen muchos más inventarios de estas emisiones, que llevan cuenta de sus cambios y se actualizan de manera constante. Entre estos esfuerzos para estimar las emisiones de carbono por fuentes fósiles se encuentra CEDS (*Community Emissions Data System*) [1], siendo esta base de datos la empleada para las emisiones fósiles de CO₂. Esta elección se basa en que tanto CEDS junto a EDGAR (*Emissions Database for Global Atmospheric Research*) [2] son las únicas bases de datos que incluyen todas las fuentes fósiles de emisiones [3]. Por último otro inventario a destacar es el GCB (*Global Carbon Budget*) [4], que desde el 2005 se actualiza anualmente y cuyo propósito principal es el entendimiento del ciclo global del carbono. En la Figura 4.1 se muestran los datos reportados por los tres inventarios mencionados.

Al observar el comportamiento de los datos reportados y mostrados en la Figura 4.1 el comportamiento es bastante similar, sin embargo los valores presentan ligeras variaciones, lo que nos lleva a preguntarnos: ¿por qué existen estas discrepancias? La respuesta depende de muchos factores, siendo los más relevantes la elección de las fuentes de emisión incluidas en cada inventario, la metodología empleada por cada país para informar de sus emisiones,

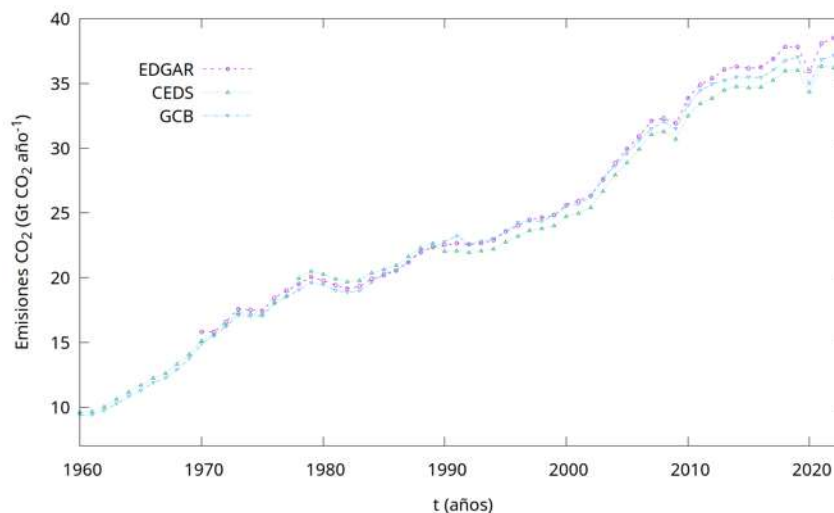


Figura 4.1: Comparativa entre distintas bases de datos de emisiones anuales de CO_2 provenientes de fuentes fósiles. Los datos de EDGAR provienen de [5], los de CEDS [6] y para GCB [7].

la ausencia de una metodología estándar, la calidad de los datos facilitados y la ausencia de algunos de ellos, ya que se trata de información de carácter militar o político, o porque se informa en año calendario o año fiscal.¹¹ También pueden producirse errores o discrepancias sin explicación. Para reducir las diferencias entre los distintos inventarios, es necesario homologar las metodologías, ser transparentes con las emisiones reportadas y definir claramente qué fuentes de emisión se deben tener en cuenta. Todo lo anterior es solo una fracción de los problemas con los inventarios de emisiones fósiles de CO_2 ; el informe completo y detallado está hecho por [3].

Los datos empleados sobre las emisiones fósiles de CH_4 y N_2O provienen de PRIMAP-hist,¹² una base de datos que combina y armoniza diversas fuentes y que, además de proporcionar datos sobre los principales GHG, también ofrece información sobre gases halogenados [8]. Al igual que en el caso del CO_2 , las emisiones de CH_4 y N_2O presentan discrepancias entre inventarios debido a diferencias metodológicas, a la calidad de los datos reportados por cada país, a la inclusión o exclusión de determinadas fuentes y, en algunos casos, a la disponibilidad limitada de información. Una de las ventajas de PRIMAP-hist es que aplica

¹¹El año fiscal es un período que se utiliza para asuntos fiscales y que no necesariamente coincide con el año natural.

¹²*Potsdam Realtime Integrated Model for probabilistic Assessment of emissions Paths*

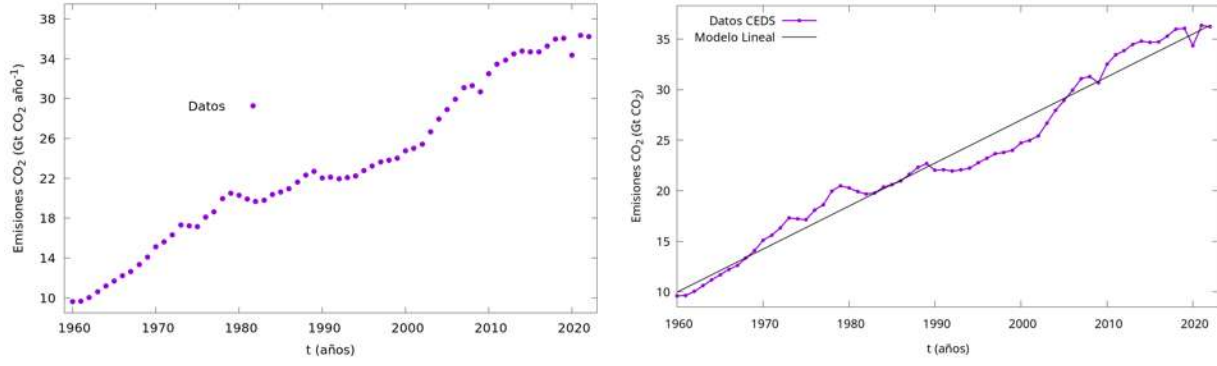


Figura 4.2: A la izquierda datos de $E_{CO_2}^F$ reportados por CEDS, a la derecha los datos junto a un modelo de ajuste lineal, siendo el modelo el siguiente: $y(t) = 0,431t - 829,4$.

procedimientos de armonización y relleno de huecos que reducen estas inconsistencias y ofrecen un conjunto de datos más coherente y comparable en el tiempo. No obstante, como ocurre con cualquier inventario global, persisten incertidumbres asociadas a la variabilidad regional y a la falta de estandarización completa en los informes. Los datos específicos utilizados en este trabajo pueden consultarse [9].

4.2.1. Emisiones fósiles de CO_2

El modelo propuesto para las $E_{CO_2}^F$ es el siguiente

$$\frac{d^2(E_{CO_2}^F)}{dt^2} + \gamma_1 \frac{d(E_{CO_2}^F)}{dt} + \omega_1(E_{CO_2}^F) = F_1 \cos(\Omega_1 t), \quad (4.1)$$

donde, γ_1 es el coeficiente de amortiguamiento, ω_1 la frecuencia natural, F_1 la amplitud de la fuerza externa y Ω_1 la frecuencia de esta. La elección de la fuente oscilatoria se basa en el comportamiento de los datos, que crecen exponencialmente, pero también presentan oscilaciones de baja frecuencia. Esto puede observarse en la Figura 4.2, donde estas oscilaciones abarcan periodos de aproximadamente 30 años. Dichas oscilaciones se aprecian mejor al comparar las emisiones con un modelo lineal. El forzamiento externo oscilatorio representa una idealización de las perturbaciones externas antropogénicas.

En este modelo, el vector $\bar{\mathbf{u}}$ está compuesto por los cuatro parámetros mencionados anteriormente y las dos condiciones iniciales, lo que da un total de seis parámetros, cuyos valores se encuentran en la Tabla 4.2. Para obtener este vector de solución, se empleó el método de cruzamiento SBX ($\eta = 2$) y mutación uniforme. Durante las primeras 2000

Cuadro 4.2: Valores del vector $\bar{\mathbf{u}}$ que constituyen el ADN del mejor organismo y que dan solución a la Ec. (4.1). El tiempo cero de las condiciones iniciales se corresponde con el año 1960.

$E_{\text{CO}_2}^{\text{F}}(0)$	$E_{\text{CO}_2}^{\text{F}'}(0)$	$\gamma_1 \times 10^{-2}$	$\omega_1 \times 10^{-3}$	$F_1 \times 10^{-2}$	Ω_1	$\overline{E_{\text{CO}_2}^{\text{F}}}$	SSE	R^2
9.65046	0.29265	8.4116	-1.616	-7.1618	0.20291	23.19443	21.05354	0.99458

generaciones, la función de fortaleza fue MAPE, mientras que para el resto de generaciones se empleó RMSE.

En el modelo (4.1), donde $E_{\text{CO}_2}^{\text{F}}(t)$ representa la tasa de emisiones de CO_2 en $\text{Gt CO}_2/\text{año}$, la interpretación de los parámetros se corresponde con la dinámica que genera dichas emisiones, de modo que el amortiguamiento modela los cambios abruptos en las emisiones, que pueden deberse a políticas medioambientales, avances tecnológicos en los procesos industriales y a la transición hacia energías más limpias. Estos efectos regulan las emisiones a corto plazo. Por otra parte, el parámetro la frecuencia natural del sistema, modela la trayectoria de las emisiones a largo plazo, un comportamiento marcado por los cambios en la infraestructura y el desarrollo económico global.

Mencionamos que los datos presentan oscilaciones que abarcan un periodo aproximado de 30 años. Podemos comprobar si el modelo puede replicar esto calculando el periodo, es decir, el tiempo que transcurre entre dos crestas de una oscilación. El periodo se calcula como sigue

$$T = \frac{2\pi}{\Omega}, \quad (4.2)$$

donde Ω es la frecuencia de la fuerza externa, por lo que, con el valor obtenido con el Mulo, el periodo tiene un valor $T = 30,96$ años, que coincide con la observación previa. La Figura 4.3 muestra la comparativa entre la solución obtenida con el Mulo y los datos observacionales.

El uso de distintas métricas de error es clave para validar la solución obtenida. Al emplear varias métricas de error, es posible verificar mejor el ajuste del modelo propuesto [10]. Las métricas utilizadas son: el SSE, que se empleó en el capítulo anterior para evaluar las soluciones obtenidas; la raíz normalizada del error cuadrático medio (nRMSE, por sus siglas en inglés), a la que se suma el coeficiente de determinación (R^2); y, por último, el porcentaje de error. El coeficiente de determinación indica qué tan cerca están los datos de la solución

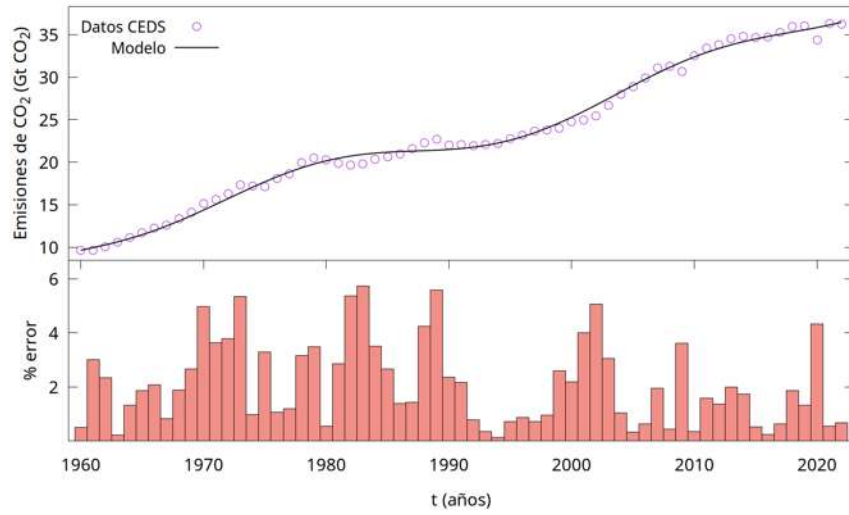


Figura 4.3: Solución a la Ec (4.1) usando los valores de la Tabla 4.2. El modelo captura de buena forma el comportamiento de los datos, lo cual se ve reflejado en el porcentaje de error que no sobrepasa el 6 %.

propuesta y se calcula de la siguiente forma

$$R^2 = 1 - \frac{SSE}{SST}, \quad (4.3)$$

donde SSE es la suma del cuadrado de los errores (véase Ec. 3.12) y SST es la suma total de los cuadrados que se define

$$SST = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}), \quad (4.4)$$

siendo $\bar{y}$ el promedio de los datos observacionales. En el mejor de los escenarios, los datos simulados serán idénticos a los observacionales, por lo que $R^2 = 1$. De la Tabla 4.2 obtenemos un valor para $R^2 = 0,99458$, lo que indica un buen ajuste de los datos. No obstante, el coeficiente de determinación está asociado a ajustes lineales, por lo que su uso por sí solo en modelos no lineales no garantiza un buen ajuste [11]. Por este motivo, en este trabajo empleamos otras medidas además de R^2 para validar el ajuste obtenido.

Partiendo del valor de SSE podemos calcular nRMSE, esta métrica nos indica la desviación porcentual del ajuste con respecto al promedio de los datos, y se calcula como sigue

$$nRMSE = \sqrt{\frac{SSE}{\bar{y}}}, \quad (4.5)$$

la solución obtenida presenta una variación del 2.5 % con respecto al promedio de los datos. Por último en la Figura 4.3 el porcentaje de error no supera el 6 %, lo que termina de

Cuadro 4.3: Vector solución $\bar{\mathbf{u}}$ de la Ec. (4.6), que se corresponde con el ADN del mejor organismo. El tiempo cero se corresponde con el año 1960.

$E_{\text{CH}_4}^{\text{F}}(0)$	$E_{\text{CH}_4}^{\text{F}}(0)'$	$\gamma_2 \times 10^{-2}$	$\omega_2 \times 10^{-4}$	$F_2 \times 10^{-2}$	Ω_2	$\overline{E_{\text{CH}_4}^{\text{F}}}$	SSE	R^2
83.619	3.26526	2.15673	-2.64636	9.98275	0.12972	152.20245	600	0.99336

corroborar el buen ajuste obtenido con este modelo.

4.2.2. Emisiones fósiles de CH_4

El modelo propuesto para ajustar las emisiones fósiles de CH_4 es el siguiente

$$\frac{d^2(E_{\text{CH}_4}^{\text{F}})}{dt^2} + \gamma_2 \frac{d(E_{\text{CH}_4}^{\text{F}})}{dt} + \omega_2(E_{\text{CH}_4}^{\text{F}}) = F_2 \sin(\Omega_2 t), \quad (4.6)$$

la tasa de cambio en las emisiones con unidades $\text{Tg CH}_4/\text{año}$ es representada por $E_{\text{CH}_4}^{\text{F}}$. Los parámetros γ_2 y ω_2 representan el amortiguamiento y la frecuencia natural respectivamente. La amplitud de la fuerza externa es representada por F_2 y su frecuencia por Ω_2 . Los valores de estos parámetros, así como las condiciones iniciales obtenidas con el Mulo, se muestran en la Tabla 4.3. En este caso, el vector $\bar{\mathbf{u}}$ consta de seis genes. Para obtener estos valores, el método de cruzamiento fue SBX ($\eta = 2$) y mutación uniforme. Se emplearon dos funciones de fortaleza: SMAPE para la primera mitad de las generaciones y RMSE para el resto.

Las emisiones fósiles de CH_4 se originan en emisiones fugitivas derivadas de la extracción y el transporte de hidrocarburos, así como de vertederos y del tratamiento de aguas residuales. Por consiguiente, el amortiguamiento se atribuye a las políticas medioambientales que restringen la extracción y el transporte de combustibles fósiles, así como a las mejoras implementadas en el almacenamiento de desechos y en los procesos de tratamiento de aguas residuales. La frecuencia natural de las emisiones está directamente relacionada con el incremento de la demanda de combustibles, lo que resulta en un aumento constante de estas emisiones. Finalmente fuerza externa, así como las emisiones de CO_2 , modela la influencia en el desarrollo económico a escala global.

Las emisiones junto a la solución de la Ec. (4.6) se muestran en la Figura 4.4. Se observa que los datos crecen de forma exponencial; sin embargo, a diferencia del CO_2 fósil, no presenta oscilaciones apreciables. Al calcular el periodo para los datos, se obtiene un valor de $T =$

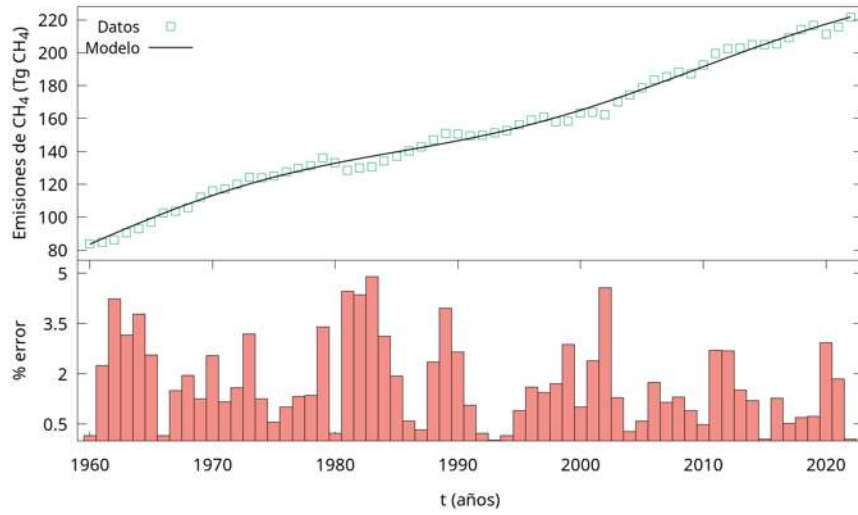


Figura 4.4: Solución de la Ec. (4.6) usando los valores de la Tabla 4.3, en este caso el porcentaje de error no supera el 5 %.

48,44 años, consistente con los datos y la solución.

En cuanto a las métricas de error, el valor SSE es de 600, lo que supone una desviación del 2,03 % de la media de los datos. Este resultado sugiere un ajuste adecuado, que se ve respaldado por el valor de R^2 . El porcentaje de error se mantiene en por debajo del 5 %, lo que valida la precisión del ajuste realizado.

4.2.3. Emisiones fósiles de N_2O

Las emisiones fósiles de N_2O son modeladas empleando la siguiente EDO

$$\frac{d^2(E_{N_2O}^F)}{dt^2} + \gamma_3 \frac{d(E_{N_2O}^F)}{dt} + \omega_3 (E_{N_2O}^F - \overline{E_{N_2O}^F}) = F_3 \sin(\Omega_3 t) \quad (4.7)$$

la tasa de cambio en las emisiones posee unidades de Tg N_2O /año, y, de manera análoga a las EDO previas, se hallan términos para amortiguamiento (γ_3) y frecuencia natural (ω_3). No obstante, este modelo cuenta con el añadido de la media de los datos ($\overline{E_{N_2O}^F}$), lo que implica que el modelo describe cómo las emisiones cambian en relación con la media. Esta modificación se debe al comportamiento de los datos, los cuales pueden ser observados en conjunto con la solución obtenida en la Figura 4.5. En dicha figura, se observa que las emisiones se mantienen relativamente constantes oscilando entre 2-2.4 Tg a lo largo de gran parte de la ventana de tiempo.

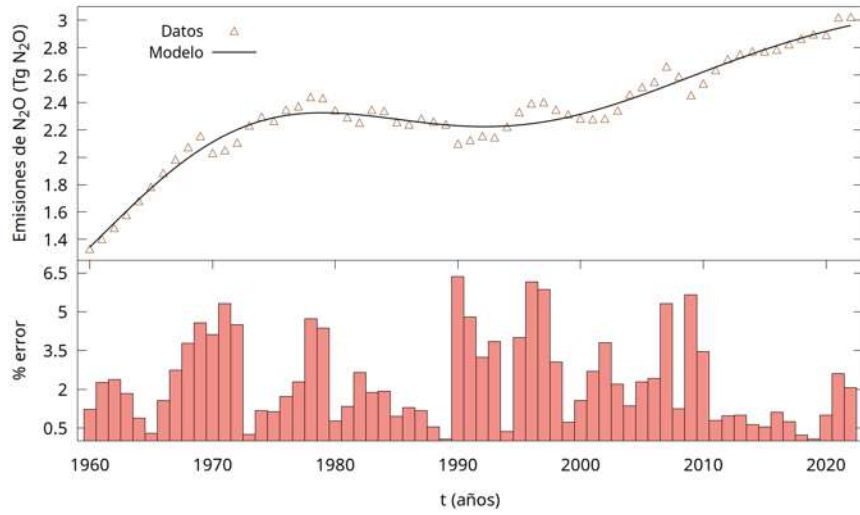


Figura 4.5: Solución obtenida para la Ec. (4.7) usando los valores que se encuentran en la Tabla 4.4, el porcentaje de error se encuentra por debajo del 7%.

Cuadro 4.4: Vector solución para la Ec. (4.7) obtenido con el Mulo. El tiempo cero para las condiciones iniciales es el año 1960.

$E_{N_2O}^F(0)$	$E_{N_2O}^{F'}(0) \times 10^{-2}$	$\gamma_3 \times 10^{-2}$	$\omega_3 \times 10^{-2}$	$F_3 \times 10^{-2}$	$\Omega_3 \times 10^{-3}$	$\overline{E_{N_2O}^F}$	SSE	R^2
1.34344	8.7715	6.46221	1.82448	4.60143	-7.93341	2.3193	0.27417	0.96676

Los valores obtenidos para el vector $\bar{\mathbf{u}}$ con el Mulo para dar solución a la Ec. (4.7) se encuentran en la Tabla 4.4, para obtener estos valores el método de cruzamiento fue SBX ($\eta = 2$) con mutación uniforme, de igual forma que en los modelos anteriores la función de fortaleza sMAPE fue empleada para las primeras 2000 generaciones y RMSE para las 2000 restantes

En contraste con las emisiones de CO_2 y metano CH_4 la mayor parte de las emisiones N_2O no provienen de fuentes fósiles, sino de la aplicación de fertilizantes [12]. Por lo tanto, el continuo crecimiento en el uso de combustibles fósiles y el crecimiento industrial afectan de manera mucho más gradual el crecimiento de estas emisiones. Esto se ve reflejado en el signo positivo de ω_3 , que mantiene la tendencia de emisiones constante. Finalmente, la fuerza externa incide lentamente con un periodo de $T \approx 800$ años.

Una vez establecida la relación entre los parámetros y el comportamiento de los datos, evaluamos el rendimiento del modelo. En un primer momento, el valor de SSE que aparece en la Tabla 4.4 podría indicar que este es el mejor ajuste, si lo comparamos con los valores

de los ajustes previos. Sin embargo, el porcentaje de desviación con respecto a la media es del 2,84 %, similar al de los ajustes previos. Por otra parte, el coeficiente R^2 nos indica que el ajuste no es tan bueno; esto se debe a que, si bien los datos se mantienen constantes, lo hacen oscilando en un rango y el modelo, al no capturar estas oscilaciones, se ve penalizado. La última métrica nos indica que el porcentaje de error se mantiene por debajo del 7 %, lo que sigue estando dentro del rango de un buen ajuste. Este conjunto de datos ejemplifica la necesidad de utilizar varias métricas de error para evaluar los ajustes obtenidos.

4.3. Cambio de uso de suelos

Previo a la revolución industrial, el incremento de la concentración de CO_2 se debía principalmente a las emisiones LULUCF [13]. Este término, cambio de uso de los suelos o LULUCF, incluye la deforestación, la urbanización, la agricultura y la reforestación. Esto se puede observar en la Figura 4.6, si bien en las últimas décadas esta tendencia se ha revertido debido a la dependencia de los combustibles fósiles. No obstante, la contribución de esta fuente no debe pasarse por alto: para el año 2000, se estimó que entre 23 y 43 ppm de CO_2 eran debidas a fuentes LULUCF [14]. Además, en el trabajo previo se estima que a principios del nuevo milenio, entre un tercio y la mitad de la superficie terrestre había sido modificada por la acción humana, lo que exacerba el calentamiento global: por un lado, la conversión de la superficie para dar paso a actividades que generan emisiones fósiles y, por otro, la reducción del potencial de los árboles para capturar CO_2 .

Esta deforestación y cambio en el uso del suelo para convertir bosques en pastizales o tierras de cultivo son las fuentes LULUCF de CH_4 y N_2O , como los campos de cultivo de arroz, la aplicación de fertilizantes sintéticos y la ganadería. De las emisiones totales de CH_4 , un 60 % proviene de la acción humana, de las cuales casi un 50 % proviene de fuentes LULUCF [15]. Por otra parte, del N_2O , el 65 % de las emisiones totales proviene de la actividad humana, y la gran mayoría de estas emisiones proviene de fuentes agrícolas [16].

Las emisiones LULUCF presentan variaciones interanuales considerablemente altas entre las distintas bases de datos, a lo que se suman las diferencias metodológicas empleadas en

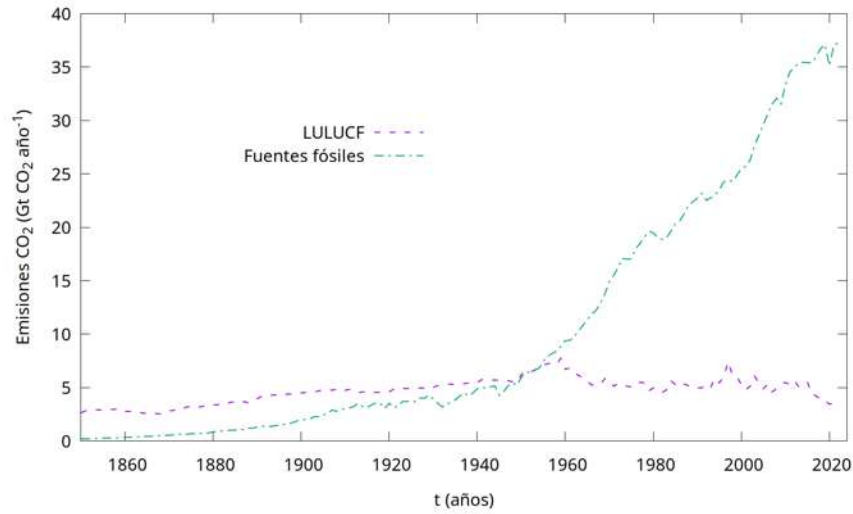


Figura 4.6: Comparación histórica de las emisiones de CO₂, derivadas de fuentes fósiles y LULUCF. Datos del GCB.

su estimación. Esta combinación dificulta la creación de una base de datos armonizada de los registros lo aumenta el riesgo de caer en interpretaciones equivocadas. Precisamente por estas razones, PRIMAP ha optado por no incluir datos LULUCF en sus actualizaciones más recientes.

Tomando en cuenta los argumentos expuestos en los párrafos previos —que las emisiones de CO₂ provenientes de LULUCF son relativamente pequeñas pero no despreciables, y que una fracción significativa de las emisiones de CH₄ y N₂O tiene su origen en este sector—, así como las discrepancias existentes entre diferentes bases de datos, se decidió emplear datos de emisiones LULUCF cuyas fuentes se citarán en la sección correspondiente. Es importante subrayar que los modelos aplicados a este tipo de emisiones deben interpretarse con especial cautela: un ajuste satisfactorio para un conjunto específico de datos no garantiza un desempeño equivalente frente a otra serie temporal. A modo de ejemplo, ilustraremos esta situación utilizando las emisiones de CO₂.

4.3.1. Emisiones LULUCF de CO₂

Al igual que en el caso de las $E_{CO_2}^F$, existen inventarios de las emisiones procedentes del LULUCF $E_{CO_2}^L$, cuya metodología se basa en modelos de contabilidad que calculan las emisiones derivadas de la conversión de ecosistemas en terrenos agrícolas y de pastoreo, así

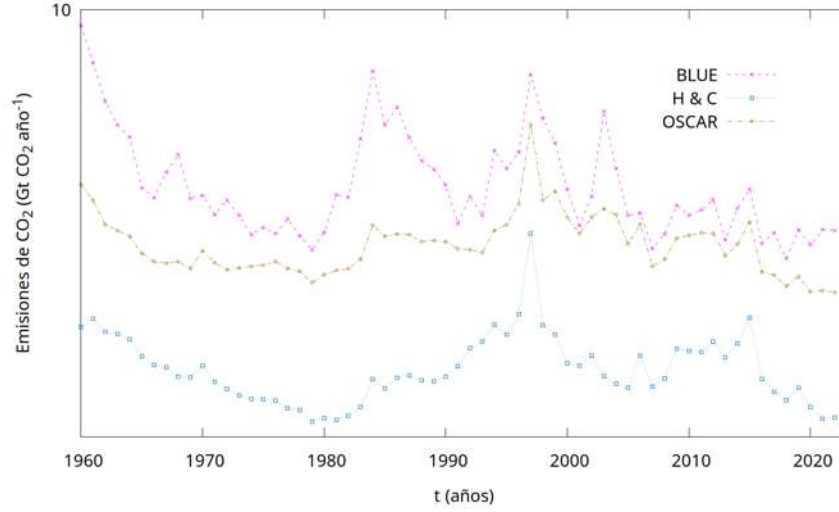


Figura 4.7: Comparativa de los inventarios OSCAR, BLUE y H&C para $E_{\text{CO}_2}^{\text{L}}$. Los datos estan reportados por el GCB [7] y son actualizados anualmente.

como de la tala de madera de bosques. De esta metodología resaltan tres inventarios: BLUE [17], OSCAR [18] y el enfoque de Houghton y Castanho (H&C) [19]. En la Figura 4.7 se muestran los datos reportados por estos tres inventarios.

De la Figura 4.7, podemos observar marcadas diferencias entre las series de datos, esto debido a lo mencionado previamente. Dado este comportamiento tan variado se propone una variación al modelo de oscilador forzado y amortiguado, como sigue

$$\frac{d^2(E_{\text{CO}_2}^{\text{LUC}})}{dt^2} + \gamma_4 \frac{d(E_{\text{CO}_2}^{\text{LUC}})}{dt} + \omega_4 \left(E_{\text{CO}_2}^{\text{LUC}} - \overline{E_{\text{CO}_2}^{\text{LUC}}} \right) = F_4 \sin(\Omega_4 t + \phi_1), \quad (4.8)$$

en este modelo se incluye el promedio de los datos en la serie temporal ($E_{\text{CO}_2}^{\text{LUC}} - \overline{E_{\text{CO}_2}^{\text{LUC}}}$). Esto hace que ahora el modelo fluctúe alrededor del promedio de los datos y no sobre la serie de tiempo. Este cambio responde al comportamiento de los datos. Otro cambio es la inclusión de una fase (ϕ) en el forzamiento externo. Este parámetro indica si la oscilación externa comienza antes o después del inicio de la serie de tiempo. El resto de parámetros, γ_4 y ω_4 son el amortiguamiento y la frecuencia natural, respectivamente, F_4 es la amplitud de la fuerza externa, mientras que Ω_4 la frecuencia de esta.

La inclusión de la fase deja el vector $\bar{\mathbf{u}}$ compuesto por un total de siete genes, la Ec. (4.8) se empleó para modelar los tres inventarios mencionados, siendo el mejor ajuste el obtenido con los datos de OSCAR cuyos valores se encuentran en la Tabla 4.5. Para obtener

Cuadro 4.5: Vector solución de la Ec (4.8) para los datos reportados por OSCAR que corresponde al ADN del mejor individuo. El tiempo cero se corresponde con el año 1960.

$E_{CO_2}^{LUC}(0)$	$E_{CO_2}^{LUC'}(0) \times 10^{-2}$	$\gamma_4 \times 10^{-2}$	ω_4	F_2	Ω_4	ϕ_1	$\overline{E_{CO_2}^{LUC}}$	SSE	R^2
6.1845	- 8.8757	- 1.06507	0.22545	-0.11734	-0.13827	10.95956	5.59407	5.43537	0.71692

Cuadro 4.6: Vectores solución a la Ec (4.8) que corresponde al ADN del mejor individuo, para los datos de H & C y BLUE. El tiempo cero se corresponde con el año 1960.

Datos	$E_{CO_2}^{LUC}(0)$	$E_{CO_2}^{LUC'}(0)$	γ_4	ω_4	F_4	Ω_4	ϕ_1	$\overline{E_{CO_2}^{LUC}}$	SSE	R^2
H & C	4.01719	0.45235	1.60726	0.40333	0.27303	0.13889	25.85224	3.26435	11.67706	0.53324
BLUE	9.89	-1.63372	2.47224	0.44322	0.4703	-0.13897	1.61595	6.70651	25	0.57323

esos valores en el Mulo, se empleó como función de cruzamiento SBX ($\eta = 2$) y mutación uniforme. Las funciones de fortaleza empleadas fueron sMAPE para la primera mitad de las generaciones y RMSE para la mitad restante.

Los parámetros obtenidos para los conjuntos de datos BLUE y H&C se presentan en la Tabla 4.6. Para obtener los vectores $\bar{\mathbf{u}}$, se emplearon en el Mulo las especificaciones descritas en el párrafo anterior. La comparación entre la solución del modelo y los datos de OSCAR se muestra en la Figura 4.8, mientras que la misma comparación para H&C y BLUE se presenta en la Figura 4.9. A partir de una inspección visual de ambas figuras, se observa que el modelo reproduce adecuadamente los datos de OSCAR; sin embargo, su desempeño es inferior para el resto de las bases de datos, donde no logra capturar su dinámica y la solución resultante se asemeja más a una línea de tendencia.

La Tabla 4.5 muestra que el coeficiente de amortiguamiento es negativo para el ajuste de los datos de OSCAR y positivo para BLUE y H&C. En un oscilador armónico, un amortiguamiento positivo disipa la energía y estabiliza el sistema. Un amortiguamiento negativo provoca un comportamiento anti-amortiguado. Las desviaciones aumentan con el tiempo, porque hay mecanismos de realimentación positiva.

El antiamortiguamiento implica una fuente de energía adicional, lo cual no es realista en este contexto. El coeficiente de amortiguamiento puede interpretarse como un aumento en la tasa de cambio de las emisiones LULUCF, por ejemplo, a través de la expansión de campos agrícolas, incentivos económicos o respuestas poco efectivas de las políticas de conservación. El coeficiente de la frecuencia natural compensa estas emisiones, llevándolas a

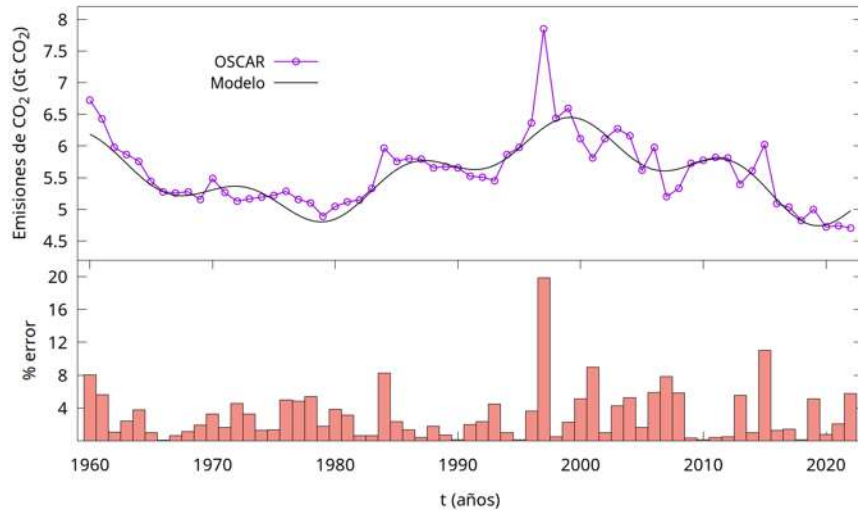


Figura 4.8: Solución a la Ec (4.8) usando los valores de la Tabla 4.5 en este caso existe un solo pico de error cercano al 20 % mientras que el resto permanece por debajo del 12 %.

oscilar alrededor de la media de los datos. Esto puede ser interpretado como reforestación y otras limitaciones. La fase en los tres casos al ser positiva indica que la perturbación externa se ve reflejada posterior al inicio del dominio temporal.

El forzamiento externo son los cambios en la demanda global de vivienda, el aumento de las áreas agrícolas y de pastoreo. La combinación de estos términos da lugar a una dinámica caracterizada por incrementos abruptos en las emisiones, modulados por una fuerza restauradora que limita su alejamiento de la media. Finalmente, es importante señalar que este modelo y los valores de los parámetros obtenidos deben interpretarse únicamente dentro de la ventana temporal empleada en este trabajo. **Dado el comportamiento de la solución obtenida, este modelo no es adecuado para extrapolaciones a largo plazo.**

Evaluando las métricas de error para los tres ajustes, obtenemos que R^2 es muy bajo para los tres ajustes algo completamente esperable dado que las soluciones no reproducen satisfactoriamente el comportamiento de los datos observacionales. El porcentaje de error en el ajuste de los datos de BLUE presenta valores superiores al 15 % en diversos puntos, en el ajuste de los datos de H&C esto se repite solo que los valores superan un 18 % de error. En el ajuste de los datos de OSCAR solo hay pico cercano al 20 % en el año 1997, este pico de emisiones se debe a los masivos incendios forestales ocurridos en Indonesia que liberaron grandes cantidades de CO_2 equivalentes a las emisiones derivadas de combustibles fósiles

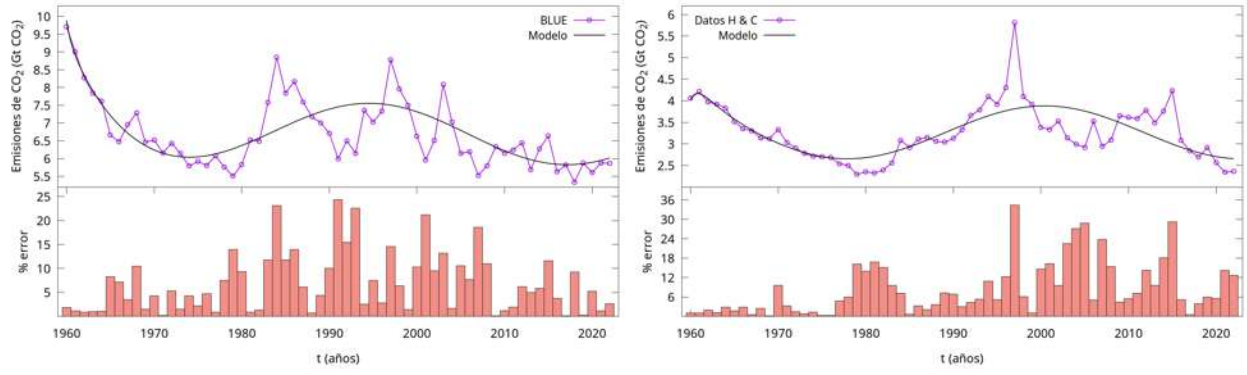


Figura 4.9: Soluciones a la Ec (4.8) usando los valores de la Tabla 4.6. A la izquierda el ajuste obtenido para los datos de BLUE. Derecha, el ajuste obtenido para los datos reportados por H & C. Los porcentajes de error alcanzan picos cercanos al 25 % para el modelado de los datos de BLUE, mientras que para los datos de H & C el error es cercano al 36 %.

[20]. Este dato es una anomalía, ya que para el resto de los datos el porcentaje de error se mantiene por debajo del 12 %.

Por último de los valores SSE se obtiene que el porcentaje de desviación respecto a la media es de 5.25 % para OSCAR, 9.40 % para BLUE y 13.2 % para los datos de H&C. De las métricas de error se concluye que los tres ajustes presentan deficiencias y que si bien el mejor ajuste es de los datos de OSCAR, este tiene la desventaja de que los parámetros no son del todo consistentes.

4.3.2. Emisiones LULUCF de CH₄

Las emisiones de CH₄ de fuentes LULUCF se modelan con la siguiente EDO

$$\frac{d^2(E_{CH_4}^{LUC})}{dt^2} + \gamma_5 \frac{d(E_{CH_4}^{LUC})}{dt} + \omega_5(E_{CH_4}^{LUC}) = F_5 \sin(\Omega_5 t + \phi_2), \quad (4.9)$$

el principal contribuyente a las emisiones LULUCF de CH₄ es el ganado rumiante mediante un proceso conocido como fermentación entérica, que forma parte del ciclo digestivo de estos animales, en el que la microbiota descompone y fermenta los alimentos que consumen para producir la energía que necesitan, además de metano como subproducto. La contribución del ganado a las emisiones globales de CH₄ es del 30 % [21]. Otra contribución considerable son los arrozales. Esto se modela con el término de forzamiento, donde la fase (ϕ_2) determina en qué momento se presenta el efecto del forzamiento. En este caso, el valor de la fase, indica

Cuadro 4.7: Vector solución de la Ec. (4.9), cuyos valores son el ADN del mejor organismo. El tiempo cero se corresponde con el año 1960.

$E_{CH_4}^{LUC}(0)$	$E_{CH_4}^{LUC'}(0)$	$\gamma_4 \times 10^{-2}$	$\omega_4 \times 10^{-4}$	$F_4 \times 10^{-2}$	Ω_4	ϕ	$\overline{E_{CH_4}^{LUC}}$	SSE	R^2
92.94768	1.53108	6.62641	-2.32761	6.10826	0.17964	-6.22448	122.183	48.57413	0.99555

que el forzamiento ya estaba presente antes del período de tiempo cubierto por los datos.

El amortiguamiento regula el crecimiento de las emisiones, lo que se refleja en una mejor gestión de la ganadería y del cultivo del arroz, en políticas de control de emisiones y en delimitaciones de los campos de pastoreo y de cultivo. Por último, la frecuencia natural modula las emisiones con respecto a su propio crecimiento; esto se traduce en que el número de cabezas de ganado y la superficie de los campos de cultivo no aumentan de forma exponencial, sino que se mantienen en niveles relativamente estables. En la Tabla 4.7 se encuentra el conjunto de valores obtenidos con el modelo que dan solución a la Ec. (4.9). Para llegar a estos valores fue empleado el método SBX ($\eta = 2$) como cruzamiento junto a mutación uniforme, la función de fortaleza empleada fue sMAPE en las primeras 2000 generaciones, mientras que RMSE fue empleada en las 2000 generaciones restantes.

A partir de los valores indicados en la Tabla 4.7, calculamos un período de $T \approx 35$ años, valor similar al obtenido en los modelos fósiles de CO_2 y CH_4 . Al evaluar el rendimiento del modelo mostrado en la Figura 4.10, obtenemos un valor sólido para R^2 , corroborado por un porcentaje de error inferior al 2 %. El valor de SSE da un porcentaje de desviación del 0,72 % con respecto a la media de los datos, lo que reafirma un ajuste robusto para esta serie de datos.

4.3.3. Emisiones LULUCF de N_2O

El modelo empleado para ajustar a las emisiones LULUCF de N_2O es el siguiente

$$\frac{d^2(E_{N_2O}^{LUC})}{dt^2} + \gamma_6 \frac{d(E_{N_2O}^{LUC})}{dt} + \omega_6(E_{N_2O}^{LUC}) = F_6 \cos(\Omega_6 t), \quad (4.10)$$

el incremento de esta fuente de emisiones se debe a la aplicación de fertilizantes artificiales, la mayoría de los cuales tienen como base el nitrógeno. Otros elementos usados para la fabricación de fertilizantes son el fósforo y el potasio. No obstante, el uso de fertilizantes con

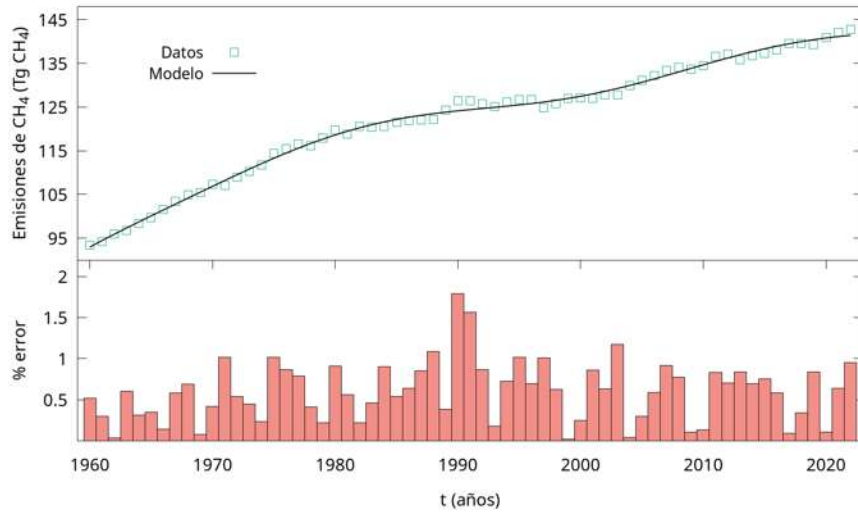


Figura 4.10: Comparativa de los datos observacionales junto a la solución de la Ec. (4.9) empleando los valores reportados en la Tabla 4.7. El porcentaje de error no supera el 2%.

Cuadro 4.8: Vector solución de la Ec. (4.10), correspondiente al ADN del mejor organismo. El tiempo cero se corresponde con el año 1960.

$E_{N_2O}^{LUC}(0)$	$E_{N_2O}^{LUC'}(0)$	$\gamma_6 \times 10^2$	$\omega_6 \times 10^4$	$F_6 \times 10^3$	Ω_6	$\overline{E_{N_2O}^{LUC}}$	SSE	R^2
3.0944	0.17481	8.26865	-7.82481	7.097	0.2261	5.81523	0.27543	0.99747

base en nitrógeno suma más del 50 % del total [22]. El constante incremento de la población conlleva una mayor demanda de alimentos, lo que a su vez lleva a una mayor aplicación de fertilizantes. El vector solución obtenido con el modelo que resuelve la Ec. (4.10) se encuentra en la Tabla 4.8, para llegar a esta solución se emplearon las mismas especificaciones que en el modelo anterior.

En este caso, el amortiguamiento se debe a una mejora continua en toda la cadena de producción de fertilizantes nitrogenados, así como a la delimitación de los campos de cultivo. La frecuencia natural modela el mejor aprovechamiento de los fertilizantes en los cultivos, así como su delimitación. El resultado de este modelo junto con los datos se observa en la Figura 4.11. Al comparar esta figura con la Figura 4.5, se puede ver que las emisiones LULUCF de N_2O superan a las fuentes fósiles en más del doble y, a diferencia de estas, continúan creciendo a medida que se talan más bosques para convertirlos en campos de cultivo.

Las métricas de validación para este modelo muestran un buen ajuste, basado en el valor obtenido para R^2 y el porcentaje de error, que se mantiene por debajo del 4 %. Finalmente,

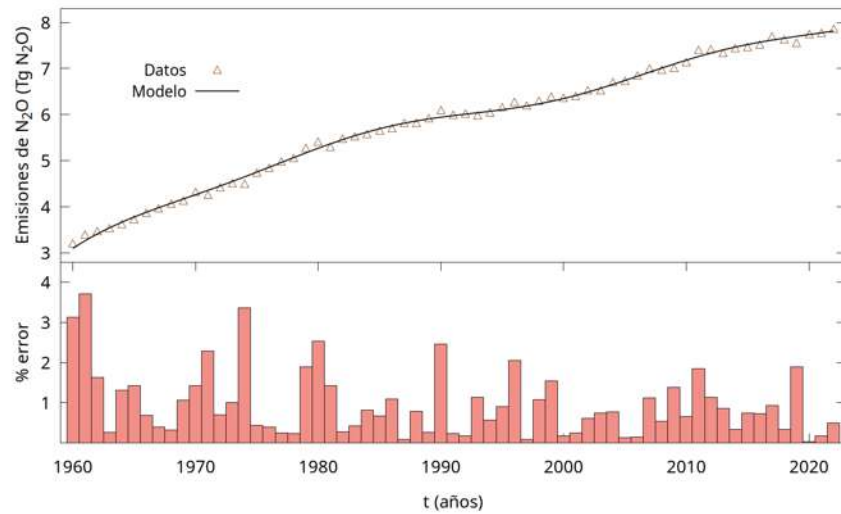


Figura 4.11: Solución a la Ec. (4.10) con los valores reportados en la Tabla 4.8 junto a los datos observacionales. El tiempo cero se corresponde al año 1960.

del SSE se deriva un porcentaje de error del 1,14 % respecto a la media, lo que corrobora el buen ajuste obtenido con el modelo.

4.4. Fracciones molares

Hemos mencionado el concepto de concentración atmosférica para hacer referencia a la cantidad de un gas presente en el aire que respiramos. Sin embargo, este enfoque no es el adecuado para conocer cuántas moléculas de gases de efecto invernadero se han agregado o eliminado de la atmósfera. La fracción molar en aire seco es la medida que se emplea para conocer la cantidad de moléculas de gas en el aire. Al extraer el vapor de agua, el aire seco no se expande cuando la temperatura aumenta o por efecto de la presión al aumentar la altura [23]. En la Tabla 4.9 se muestra la composición del aire seco para una concentración de 413 ppm de CO_2 , de aquí se aprecia mejor el concepto ppm. Las poco más de 400 moléculas de CO_2 de un millón son las que están marcando la pauta del calentamiento global, lo que nos hace poner en perspectiva que una cantidad tan pequeña tenga consecuencias tan graves.

Si bien seguiremos usando «concentración» para referirnos a la cantidad de moléculas, el término correcto es **fracción molar**. En las secciones siguientes se hará el cálculo de las concentraciones atmosféricas de CO_2 , CH_4 y N_2O .

Cuadro 4.9: Composición del aire seco con un valor de 413 ppm de CO₂. La columna de la derecha muestra el cambio al añadir un 3 % de humedad. Esta tabla está proporcionada por el NOAA y se puede consultar en el siguiente enlace: https://gml.noaa.gov/ccgg/about/co2_measurements.html

Molécula	Aire seco	Aire húmedo (3 %)
Nitrógeno	780900	757473
Oxígeno	209360	203079
Vapor de agua	0	30000
Argon	9300	9021
Dióxido de carbono	413	400.6
Neon	18	17.5
Helio	5	4.9
Metano	2	2
Krypton	1	1
Trazas de otros gases (menos de 1)	1	1
Total	1000000	1000000

4.4.1. Concentración de CO₂ en la atmósfera

La concentración de CO₂ se ve afectada por la emisión continua de combustibles fósiles y LULUCF. Estas emisiones pueden convertirse en concentración atmosférica tomando como base la relación propuesta por [24]

$$[\text{CO}_2]_{N-1} = [\text{CO}_2]_N - \left(\frac{\alpha_{\text{CO}_2}}{\beta_{\text{CO}_2}} \right) E_{\text{CO}_2 N-1}, \quad (4.11)$$

en química, es habitual que las moléculas dentro de corchetes indiquen su concentración, por lo que $[\text{CO}_2]$ denota la concentración de CO₂ en ppm. Siendo α_{CO_2} la fracción atmosférica, que se obtiene mediante ajuste de datos. $E_{\text{CO}_2} = E_{\text{CO}_2}^{\text{F}} + E_{\text{CO}_2}^{\text{LUC}}$, N es el año. Por último, β_{CO_2} es la equivalencia de 1 ppm de CO₂ en la atmósfera, que se define como

$$\beta_{\text{CO}_2} = \left(\frac{m_{\text{ATM}}}{M_{\text{air}}} \right) M_{\text{CO}_2}, \quad (4.12)$$

donde $m_{\text{ATM}} = 5,148 \times 10^{18}$ kg es la masa de atmósfera [25], $M_{\text{air}} = 28,966$ es la masa molecular del aire [26] y $M_{\text{CO}_2} = 44,009$ es la masa molecular del dióxido de carbono, que fue calculada usando los pesos moleculares reportados por la IUPAC (de *International Union of Pure and Applied Chemistry*) [27]. Las masas moleculares al tener las mismas unidades (kg/kmol) se cancelan, lo que nos deja con un valor $\beta_{\text{CO}_2} = 7,56051 \times 10^{18}$ kg.

Al multiplicar el inverso de β_{CO_2} por su correspondiente valor de emisiones E_{CO_2} y aplicar la siguiente conversión de unidades: $1 \text{ Gt} = 1 \times 10^{12}$ kg, se obtiene una diferencia de seis órdenes de magnitud, es decir, $1 \times 10^6 = 1 \text{ 000 000}$ (1 millón), que permite expresar el

Cuadro 4.10: Vector solución de la Ec. (4.14), correspondiente al mejor organismo en el AG. El tiempo cero es el año 1960.

$[\text{CO}_2](0)$	α_{CH_4}	$[\text{CO}_2]$	SSE	R^2
315.67	0.4485	358.96508	22.5322	0.9996

resultado en partes por millón (ppm). Por tanto, la equivalencia de emisiones a concentración es de aproximadamente $7,56051 \text{ GtCO}_2 = 1 \text{ ppm CO}_2$.

Esto demuestra que la ecuación es dimensionalmente consistente. Sin embargo, este enfoque tiene una limitación: para calcular el estado actual (N) se requiere el valor del paso temporal anterior (N-1). Para resolver este problema, se plantea la modificación de la forma de la Ec. (4.11) con el objetivo de obtener una ecuación diferencial. Para lograrlo, usamos la definición de derivada.

$$\frac{du}{dt} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta t}, \quad (4.13)$$

haciendo $\Delta t = 1$ año y sustituyendo la Ec. (4.13) en (4.11) obtenemos

$$\frac{d[\text{CO}_2]}{dt} = \left(\frac{\rho_1}{\delta_{\text{CO}_2}} \right) E_{\text{CO}_2}. \quad (4.14)$$

Este nuevo enfoque mantiene el uso de ecuaciones diferenciales y solo requiere estimar la condición inicial y la fracción atmosférica (α_{CO_2}), algo que hemos estado haciendo desde el principio. Solo necesitamos los datos de la concentración de CO_2 en la atmósfera. Para ello, recurriremos a los datos proporcionados por el laboratorio Mauna Loa, ubicado en Hawái [28].

Para este modelo, el vector de solución $\bar{\mathbf{u}}$ consta de dos genes: la condición inicial y la fracción atmosférica α_{CO_2} cuyos valores se muestran en la Tabla 4.10. Para alcanzar los valores mencionados se empleó el método de cruzamiento SBX ($\eta = 2$) y una mutación uniforme. Además de la función de fortaleza MAE en todas las generaciones. Como se muestra en la Figura 4.12, una comparación entre la solución obtenida con el Mulo y los datos registrados en el observatorio Mauna Loa.

De acuerdo con [24], el valor reportado para α_{CO_2} es de 0,431, lo cual es consistente con los resultados obtenidos con el Mulo. De acuerdo con las métricas de error, se puede concluir la obtención de un ajuste robusto, con un valor de R^2 cercano a la unidad. Asimismo, se

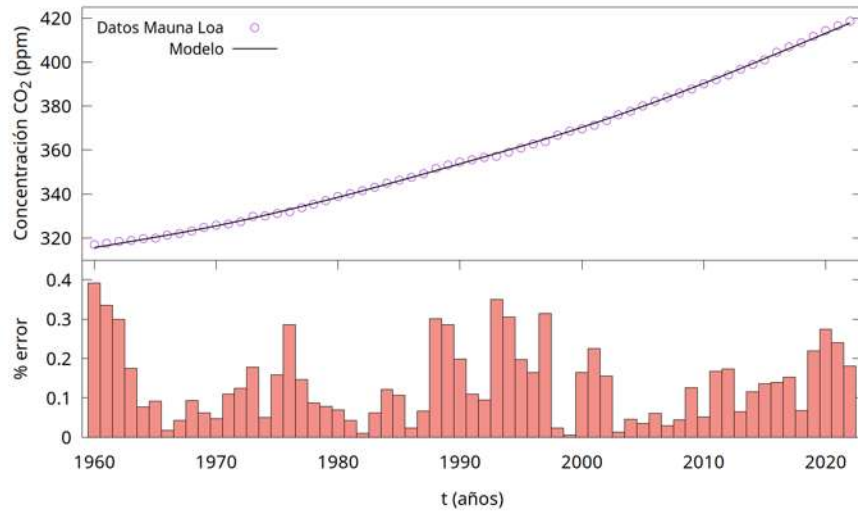


Figura 4.12: Solución a la Ec. (4.14) y los valores de la Tabla 4.10 junto a los datos observacionales del cambio en la concentración de CO_2 . El porcentaje de error se mantiene por debajo del 0.4 %.

observa que del valor de SSE se traduce en una desviación respecto a la media del 0,16 %, mientras que el porcentaje de error se mantiene por debajo del 0,4 %.

4.4.2. Concentración de CH_4 en la atmósfera

A diferencia de lo que ocurre con el CO_2 , las mediciones de la concentración de CH_4 son más recientes, por lo que no podemos abarcar la totalidad del periodo de tiempo (1960-2022) con datos observacionales, como hemos hecho hasta ahora. La Figura 4.13 muestra mediciones en diversas localizaciones del mundo y se puede observar que no abarca la totalidad de esta ventana de tiempo, por lo que recurriremos a datos simulados para completar los huecos en las mediciones.

Los escenarios SSP (del inglés *Shared Socio-economic Pathways*) propuestos en [33] constituyen un conjunto de escenarios socioeconómicos y energéticos diseñados para representar posibles futuros de la humanidad en función de nuestra dependencia de los combustibles fósiles y de las políticas climáticas. Además de generar proyecciones, los SSP incluyen series históricas de concentraciones de gases de efecto invernadero que se remontan hasta el año 1750. En la Figura 4.14 se muestran los datos del SSP junto a las observaciones presentadas en la Figura 4.13. De esta nueva figura se desprende que la serie temporal de los SSP

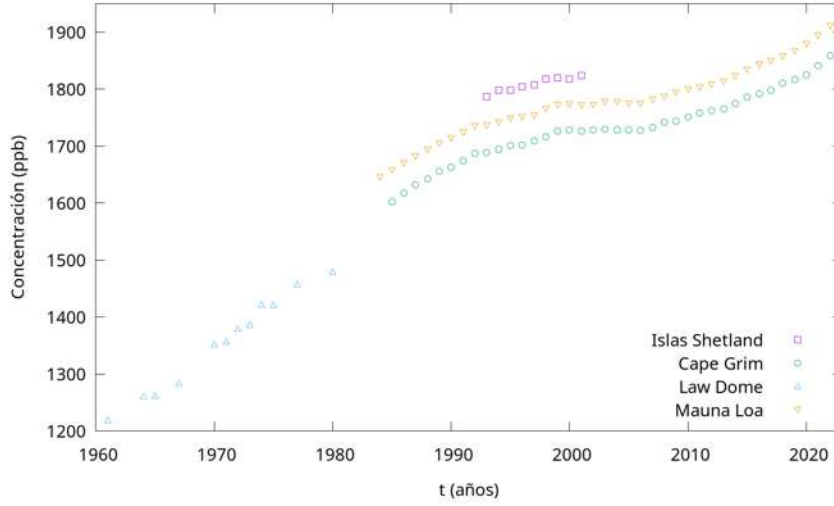


Figura 4.13: Mediciones de concentración atmosférica de CH_4 , en distintos periodos de tiempo y diferentes lugares del globo. Los datos originales pueden consultarse como sigue: Islas Shetland, Escocia [29]; Cape Grim, Australia [30]; Law Dome, Antártida [31] y Mauna Loa, Hawái [32].

presenta un comportamiento coherente con los datos del laboratorio Mauna Loa; es decir, sin saltos significativos ni cambios artificiales en la tendencia. Por esta razón, consideramos válido utilizar un conjunto amalgamado compuesto por los valores históricos del SSP y las observaciones de Mauna Loa para construir una única serie temporal consistente.

La dinámica de la concentración de CH_4 difiere de la de CO_2 , si bien ambas crecen, lo hacen siguiendo comportamientos distintos. Mientras que el carbono crece de forma exponencial, el metano lo hace de forma oscilatoria. Por este motivo, el modelo propuesto se basa en el utilizado para el CO_2 , pero con algunas modificaciones, como se muestra a continuación.

$$\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = \left[\frac{\alpha_{\text{CH}_4} \sin(\omega_7 t)}{\beta_{\text{CH}_4}} \right] E_{\text{CH}_4} + \sigma[\text{CH}_4], \quad (4.15)$$

donde E_{CH_4} representa la suma de las emisiones fósiles y LULUCF obtenidas con los modelos previamente descritos, β_{CH_4} es la equivalencia de 1 ppb de CH_4 en la atmósfera y se calcula como sigue

$$\beta_{\text{CH}_4} = \left(\frac{m_{\text{ATM}}}{M_{\text{air}}} \right) M_{\text{CH}_4}, \quad (4.16)$$

los valores m_{ATM} y M_{air} son los mismos que en la Ec. (4.12). La masa molecular de CH_4 es 16.043, por lo que $\beta_{\text{CH}_4} = 2,85125 \times 10^{18}$ kg. Las unidades de E_{CH_4} son Tg que equivale a 1×10^9 kg. La diferencia con respecto a β_{CH_4} es de 9 órdenes de magnitud, por lo que

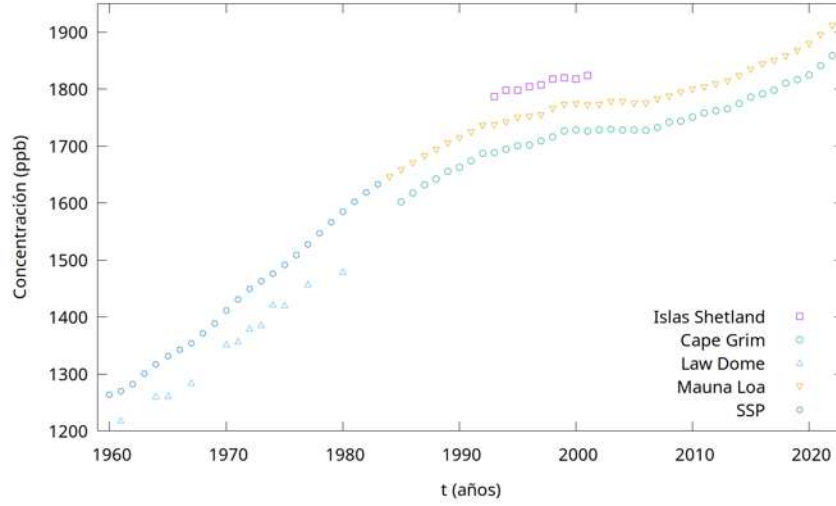


Figura 4.14: Mediciones de concentración de CH_4 en la atmósfera desde distintas zonas de la Tierra, junto con los propocionados por Meinshausen et al. [33].

Cuadro 4.11: Vector solución de la Ec. (4.15), correspondiente al mejor organismo en el AG. El tiempo cero es el año 1960.

$\alpha_{\text{CH}_4} \times 10^{-2}$	$\omega_7 \times 10^{-2}$	$\sigma \times 10^{-3}$	$[\text{CH}_4]$	SSE	R^2
9.52242	9.88173	6.91522	1647.5629	872.6333	0.99959

la concentración se expresa en ppb. Finalmente La equivalencia de emisiones de CH_4 a concentración atmosférica es de $2,85125 \text{ Tg CH}_4 = 1 \text{ ppb CH}_4$

La fracción atmosférica α_{CH_4} se modifica mediante la adición de un término oscilatorio, lo cual permite que dicha fracción experimente variaciones periódicas y, por ende, capte de manera más precisa la dinámica de la concentración. Por otra parte, el término lineal $\sigma[\text{CH}_4]$ representa un incremento en la concentración. Por lo que el vector $\bar{\mathbf{u}}$ para este modelo consta de tres genes: $(\alpha_{\text{CH}_4}, \omega_7, \sigma)$, en este escenario la condición inicial no se deja al Mulo para ser estimada, sino que se toma directamente el valor reportado por los SSP, esto se hace para que el ajuste sea más preciso. En la Tabla 4.11 se presentan los valores obtenidos con el Mulo para este modelo. En la Figura 4.15, se observa la solución obtenida en conjunto con la serie de tiempo propuesta.

Una vez examinadas las métricas de error, se evidencia un ajuste sólido de los datos, respaldado por el valor de R^2 , que se aproxima a la unidad. Además, el porcentaje de error se mantiene por debajo del 1 %, y, por último, el SSE muestra una variación del 0,22 % con

respecto a la media de los datos. Las modificaciones propuestas conllevan un modelo que con una desempeño eficiente en la reproducción de la dinámica de concentración de CH_4 en la atmósfera.

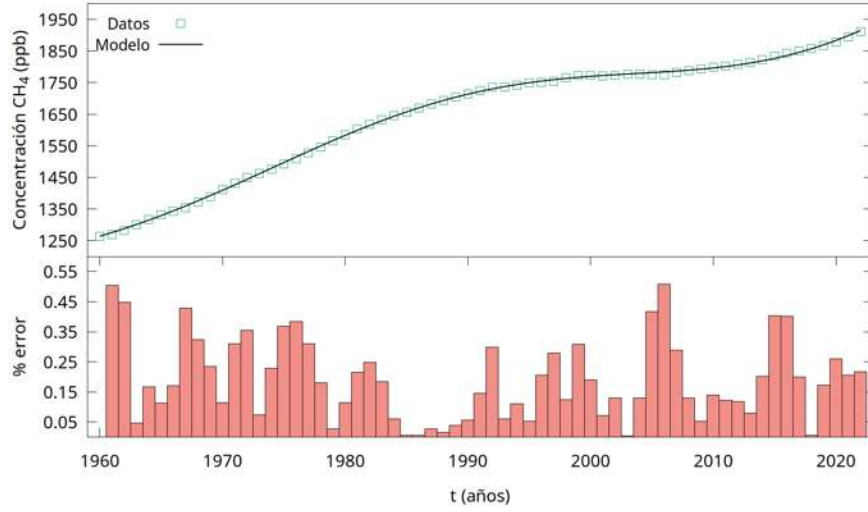


Figura 4.15: Solución de la Ec. (4.15) usando los valores de la Tabla 4.11 donde el porcentaje de error se mantiene por debajo del 0.6 %. La condición inicial $[\text{CH}_4](0)$ es de 1264.12 ppb de CH_4 .

4.4.3. Concentración de N_2O en la atmósfera

Las mediciones de N_2O en la atmósfera son aún mas recientes que las de CH_4 , por lo que usamos la misma estrategia que con el CH_4 : una serie de tiempo con datos simulados de SSP y observacionales de Mauna Loa. La Figura 4.16 muestra datos de varios esfuerzos en todo el planeta y la serie de tiempo SSP/Mauna, que se usará con la EDO.

De la serie de tiempo se observa que crece de forma exponencial con una ligera curvatura. Esto que nos lleva a usar un término oscilatorio en la fracción atmosférica de N_2O , descartando el término lineal propuesto en el modelo anterior. La EDO propuesta que ajusta a los datos de concentración de N_2O es la siguiente

$$\frac{d[\text{N}_2\text{O}]}{dt} = \left[\frac{\alpha_{\text{N}_2\text{O}} \cos(\omega_8 t)}{\beta_{\text{N}_2\text{O}}} \right] E_{\text{N}_2\text{O}}, \quad (4.17)$$

donde $E_{\text{N}_2\text{O}}$ representa la suma de emisiones fósiles y LULUCF de N_2O obtenidas con los Ecs. (4.7) y (4.10) respectivamente. La equivalencia de 1 ppb de N_2O se define

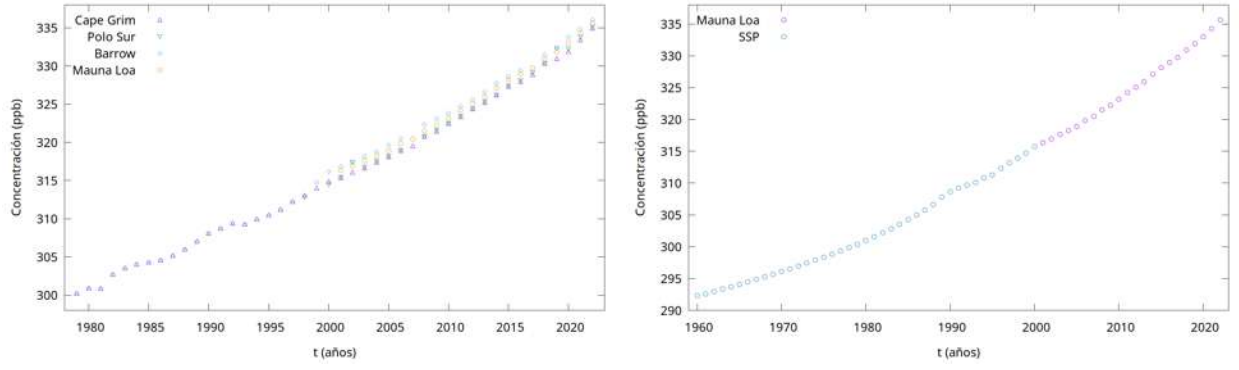


Figura 4.16: Concentración de N_2O en la atmósfera. A la izquierda datos reportados en diversos lugares del planeta: Cape Grim, Australia [30]; Polo Sur, Antártida; Barrow, Alaska; los datos de esta dos últimas provienen de [34]; finalmente Mauna Loa, Hawái [32]. A la derecha, la serie de tiempo compuesta por datos de SSP y Mauna Loa.

Cuadro 4.12: Vector solución $\bar{\mathbf{u}}$ de la Ec. (4.17), donde el tiempo cero es el año 1960.

α_{N_2O}	$\omega_8 \times 10^{-2}$	$\overline{[N_2O]}$	SSE	R^2
0.72648	1.24108	310.17587	5.7	0.99941

$$\beta_{N_2O} = \left(\frac{m_{ATM}}{M_{air}} \right) M_{N_2O}, \quad (4.18)$$

los términos entre paréntesis son los mismos que en la Sección 4.4.1. La masa molecular de N_2O es de 44.013, por lo que el valor de la equivalencia es $\beta_{N_2O} = 7,82224 \times 10^{18}$ kg. Al igual que con el CH_4 las unidades para E_{N_2O} son Tg (1 000 000 000 kg), por lo que la diferencia de 9 órdenes de magnitud se mantiene. Al multiplicar 1 Tg por la equivalencia β_{N_2O} obtenemos la equivalencia de emisiones de N_2O a concentración en la atmósfera, siendo, $7,82224 \times 10^{18}$ Tg $N_2O = 1$ ppb N_2O .

El vector solución para la Ec. (4.17) se halla en la Tabla 4.12. Para este modelo el vector $\bar{\mathbf{u}}$ consta de dos genes: α_{N_2O} y ω_8 , al igual que con el modelo de concentración de CH_4 la condición inicial se deja fijada en el valor reportado por el SSP. La solución obtenida, empleando estos valores, se muestra en la Figura 4.17. Asimismo, las métricas de error denotan un ajuste sólido, con un valor de R^2 muy cercano a la unidad. A partir del valor SSE existe una variación del 0,097% con respecto a la media y con un porcentaje de error menor al 0,3%.

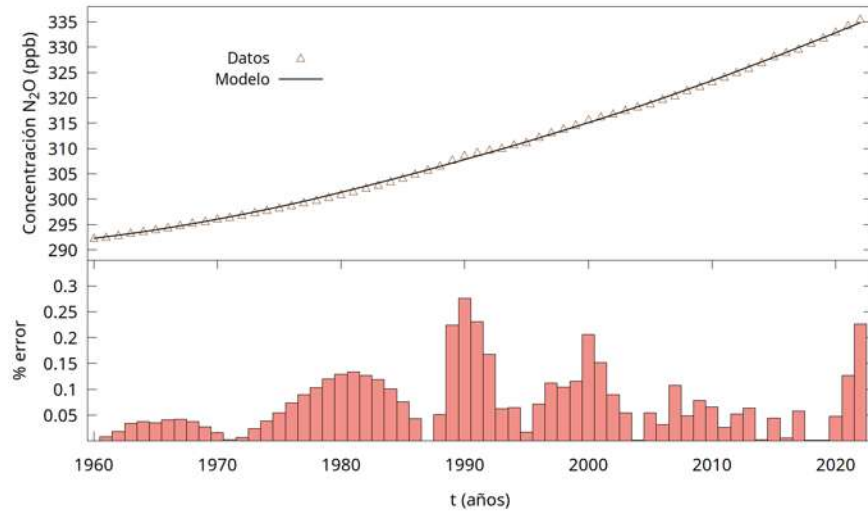


Figura 4.17: Solución de la Ec. (4.17) con los datos de la Tabla 4.12 junto a los datos observacionales. El porcentaje de error se mantiene por debajo del 0.3 %. La condición inicial $[N_2O](0)$ es de 292.28 ppb.

4.4.4. Halocarbonos

Los halocarbonos que desgastan la capa de ozono (ODS,^{iv} por sus siglas en inglés), entre los que se encuentran los CFCs, CCl_4 , CH_3Br , CH_3CCl_3 y los halones, han experimentado una disminución en su concentración desde finales de la década de 1990 debido al Protocolo de Montreal [35]. Los sustitutos de las ODS, como los HCFCs y HFCs, se hallan sujetos a la normativa establecida por la Enmienda de Kigali, aprobada en el año 2017. Dicha enmienda tiene por objeto la reducción del consumo de los HFCs en un 80 % a nivel global para el final de la década de 2040 [36]. Además, la vida media de los gases halogenados alcanza los cientos de miles de años [37]. Por lo tanto, es necesario modelar los halocarbonos directamente desde su concentración en la atmósfera.

Dicho lo anterior, cada grupo de halocarbonos presenta un comportamiento distinto. Para ajustar cada uno de estos gases se propone una EDO que capture de forma general los comportamientos de todos los gases halogenados. De esta manera al omitir alguno de los parámetros obtenemos una EDO para un gas en concreto, la EDO general propuesta es la siguiente

$$\frac{d[H_x]}{dt} = \kappa \left([H_x] - \overline{[H_x]} \right) + v \cos(\theta t + \phi) + \epsilon + \eta t, \quad (4.19)$$

^{iv} Ozone Depleting Substances

donde $[H_x]$ es la concentración del gas en ppt, $\kappa \left([H_x] - \overline{[H_x]} \right)$ es un término lineal de retroalimentación. Cuando $\kappa < 0$ la concentración tiende a la media de los datos, lo que se relaciona directamente con procesos de eliminación del gas en cuestión. Por el contrario $\kappa > 0$ denota un incremento en la concentración promedio debido al uso y emisión del gas. En los casos donde $\overline{[H_x]}$ no aparece, el parámetro κ regula los cambios sobre la concentración absoluta del gas.

Por otra parte el término $v \cos(\theta t + \phi)$ (o seno en lugar de coseno) se incluye para capturar oscilaciones en las concentraciones relacionadas a cambios en los procesos industriales (producción, fugas) y los ciclos en los que el uso de ciertos gases se ve sustuido. La amplitud v , la frecuencia θ , así como la fase ϕ mantienen la misma interpretación que hemos empleado.

Finalmente los términos ϵ y ηt son forzamientos que capturan emisiones que el resto de emisiones no pueden. El término ϵ es un aporte neto a las emisiones, mientras que el término ηt representa emisiones graduales debido a la producción para $\eta > 0$ o por el contrario una disminución gradual debido a políticas de control como el Protocolo de Montreal esto cuando $\eta < 0$. Los términos presentes en cada gas denotan la dinámica que gobierna su concentración en la atmósfera. En las secciones siguientes se muestran los resultados de aplicar la Ec. (4.19) a cada conjunto de gases halogenados. Los datos de concentraciones para todos los gases halogenados pueden consultarse en [38].

4.4.5. Clorofluorocarbonos (CFCs)

Como resultado del apego al Protocolo de Montreal la concentración de los gases clorofluorocarbonados (CFCs) ha ido en decaimiento, por lo que el comportamiento de los datos es de un crecimiento seguido de una caída. Los CFCs contenidos en este trabajo de tesis son los que se muestran en la Tabla 4.13, así como sus fórmulas químicas y la vida media de cada compuesto.

Los modelos para cada uno de los gases son como sigue

Cuadro 4.13: Vidas medias, fórmulas químicas y eficiencias radiativas para gases Clorofluorocarbonados (CFCs). Todos los valores se encuentran reportados por el IPCC [39].

Gas	Fórmula química	Vida media (años)	Eficiencia Radiativa (W ppb ⁻¹ m ⁻²)
CFC-11	CCl ₃ F	52	0,291
CFC-12	CCl ₂ F ₂	102	0,358
CFC-13	CClF ₃	640	0,278
CFC-112	CCl ₂ FCCL ₂ F	63,6	0,282
CFC-113	CCl ₂ FCCLF ₂	93	0,301
CFC-113a	CCl ₃ CF ₃	55	0,241
CFC-114	CClF ₂ CClF ₂	189	0,314
CFC-114a	CCl ₂ FCF ₃	105	0,297
CFC-115	CClF ₂ CF ₃	540	0,246

$$\frac{d[\text{CFC}_{11}]}{dt} = \kappa_1[\text{CFC}_{11}] + v_1 \cos(\theta_1 t + \phi_1), \quad (4.20)$$

$$\frac{d[\text{CFC}_{12}]}{dt} = \kappa_2[\text{CFC}_{12}] + v_2 \cos(\theta_2 t + \phi_2), \quad (4.21)$$

$$\frac{d[\text{CFC}_{13}]}{dt} = \kappa_3[\text{CFC}_{13}] + v_3 \cos(\theta_3 t + \phi_3), \quad (4.22)$$

$$\frac{d[\text{CFC}_{112}]}{dt} = \kappa_4 \left([\text{CFC}_{112}] - \overline{[\text{CFC}_{112}]} \right) + \kappa_5 \left([\text{CFC}_{112}] - \overline{[\text{CFC}_{112}]} \right)^2 + v_4 \cos(\theta_4 t), \quad (4.23)$$

$$\frac{d[\text{CFC}_{113}]}{dt} = \kappa_6[\text{CFC}_{113}] + v_5 \sin(\theta_5 t + \phi_4) + \epsilon_1, \quad (4.24)$$

$$\frac{d[\text{CFC}_{113a}]}{dt} = \kappa_7[\text{CFC}_{113a}] + v_6 \sin(\theta_6 t + \phi_5) + \epsilon_2, \quad (4.25)$$

$$\frac{d[\text{CFC}_{114}]}{dt} = \kappa_8[\text{CFC}_{114}] + v_7 \cos(\theta_7 t) + \epsilon_3, \quad (4.26)$$

$$\frac{d[\text{CFC}_{114a}]}{dt} = \kappa_9[\text{CFC}_{114a}] + v_8 \cos(\theta_8 t) + \epsilon_4, \quad (4.27)$$

$$\frac{d[\text{CFC}_{115}]}{dt} = \kappa_{10}[\text{CFC}_{115}] + v_9 \cos(\theta_9 t) + \epsilon_5, \quad (4.28)$$

en primer lugar, cabe señalar que la Ec. (4.23) presenta una modificación respecto a la forma general establecida en la Ec (4.19). Este cambio se debe a que, durante los ajustes, el modelo general no replicaba el comportamiento de los datos, lo que motivó la modificación propuesta. En este sentido, se plantea la incorporación del parámetro $\kappa_5 \left([\text{CFC}_{112}] - \overline{[\text{CFC}_{112}]} \right)^2$, que sugiere la presencia de un mecanismo de saturación alrededor de la media de la concentración de CFC-112 que no puede ser representado únicamente por el parámetro lineal. En la Tabla 4.14, se presentan los resultados del vector solución para este gas.

En la Tabla 4.15 se presentan los restantes vectores $\bar{\mathbf{u}}$ para los CFCs, mientras que en la Figura 4.18 se presentan las soluciones obtenidas para los nueve gases que integran este

Cuadro 4.14: Vector solución a la Ec. (4.23) correspondiente al mejor organismo. Para este caso la desviación con respecto a la media es del 5.2 %.

Gas	$t(0)$	κ_4	κ_5	v_4	$\theta_4 \times 10^{-2}$	$\overline{[H_x]}$	SSE	R^2
CFC-112	1978	6.81845	31.22068	1.27944	7.25088	0.3736	0.0169	0.97551

Cuadro 4.15: Vectores solución para las Ecs. (4.20)-(4.28), con excepción de la Ec. (4.23). Los valores que aquí se reportan corresponden al mejor organismo para cada caso, el tiempo inicial es distinto en cada caso.

Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	v	$\theta \times 10^{-2}$	ϕ	ϵ	$\overline{[H_x]}$	SSE	R^2
CFC-11	1960	1.97205	8.42959	9.93289	-1.36946	N/A	182.93419	1546	0.99672
CFC-12	1960	1.84639	14.09712	-8.68689	1.96019	N/A	376.87629	1964	0.99904
CFC-13	1960	2.61672	0.0709	9.20902	0.176	N/A	1.96955	0.28728	0.99656
Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	v	θ	ϕ	ϵ	$\overline{[H_x]}$	SSE	R^2
CFC-113	1965	-2.55215	2.47661	0.14924	0.15576	2.9574	52.62793	810	0.98467
CFC-113a	1978	4.15431	-0.01561	0.28574	0.29938	0.00958	0.35282	0.0711	0.98336
CFC-114	1960	-2.33	0.22232	0.12354	N/A	0.51618	12.60452	4.70725	0.99613
CFC-114a	1978	-10.10603	-0.01051	-0.21596	N/A	0.10928	0.9051	0.03907	0.98
CFC-115	1970	-0.96552	0.20564	0.15166	N/A	0.24435	5.72481	0.77926	0.99851

bloque. Mediante la comparación visual entre las soluciones y los datos observacionales, se observa un ajuste satisfactorio para todo el conjunto. Sin embargo, debido a la dispersión en los rangos de concentración y a la presencia de valores pequeños al inicio de la ventana de tiempo, algunas métricas de error pueden penalizar de forma desproporcionada a ciertos gases.

En todos los casos, los vectores solución se obtuvieron empleando cruzamiento SBX ($\eta = 2$) y mutación uniforme. Para la evaluación de la fortaleza de los individuos se utilizaron dos combinaciones de funciones de fortaleza: MAPE/MAE para los gases CFC-112 y CFC-113, y sMAPE/RMSE para el resto de gases.

Al analizar las métricas de error, se observa que el coeficiente de determinación resulta adecuado para la gran mayoría de los gases, con la excepción de CFC-113, CFC-113a y CFC-114a. Estos compuestos presentan los porcentajes de error más elevados, alcanzando valores de aproximadamente 16 % para el CFC-113 y hasta 60 % para el CFC-113a. A partir de los valores obtenidos de SSE el rango de porcentajes de variación abarcan desde 1,48 % correspondiente al CFC-12 hasta 11,26 %, asociado al CFC-113a.

En conjunto, los resultados indican que los modelos reproducen de manera satisfactoria

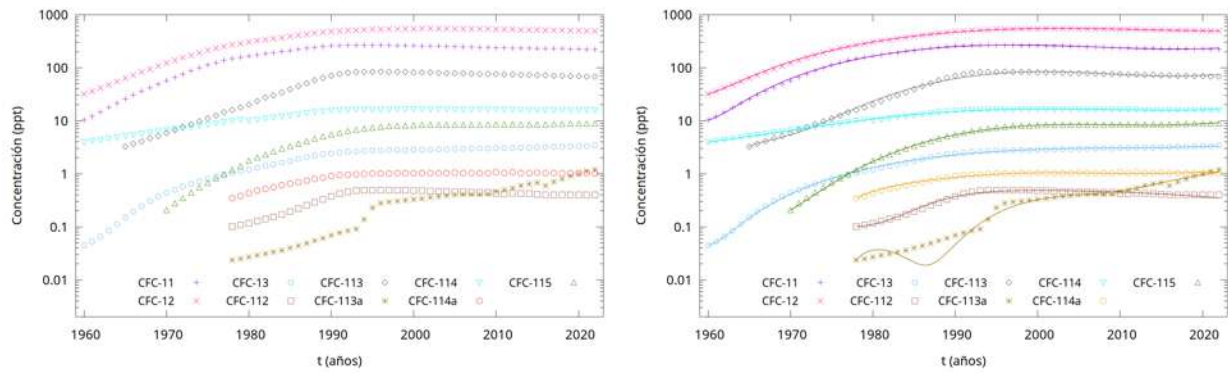


Figura 4.18: En la figura de la izquierda se muestran las concentraciones observacionales, mientras que en la figura derecha se encuentra la comparación entre los datos y las soluciones de las Ecs. (4.20)-(4.28), obtenidas con los valores de la Tablas 4.14 y 4.15. En ambas figuras se emplea escala logarítmica, y las líneas sólidas representan las soluciones correspondientes a cada gas.

la evolución temporal de las concentraciones para la mayoría de los gases analizados, si bien persisten discrepancias en algunos gases específicos, lo cual es esperable en un conjunto heterogéneo de series con magnitudes de concentración distintas.

4.4.6. Hidroclorofluorocarbonos (HCFCs)

Los hidroclorofluorocarbonos (HCFCs) desarrollados como sustitutos de CFCs han experimentado un incremento en su concentración en la atmósfera, donde los principales (HCFC-22, HCFC-141b y HCFC-142b) superan las decenas de ppt. Además, recientemente se han detectado otros HCFC de menor concentración, que no superan la unidad de ppt, cuyo origen puede deberse como subproductos de la producción de hidrofluorocarbonos (HFCs) [40].

En el grupo de los HCFCs, seis especies fueron las que se emplearon para modelar el cambio en sus concentraciones. Los gases seleccionados, junto con sus fórmulas químicas y otros datos relevantes, puede encontrarse en la Tabla 4.16. Como se desprende de la tabla, los HCFCs poseen vidas medias relativamente breves, que no superan los 20 años. En el caso concreto del HCFC-31, su vida media es inferior a un año y medio. No obstante, es necesario regular estas sustancias, dado que, a pesar de su corta vida, contienen cloro en su composición, lo que supone un riesgo para la capa de ozono.

Las EDO para cada uno de los HCFCs son las siguientes

Cuadro 4.16: Vidas medias, fórmulas químicas y eficiencias radiativas para los HCFCs. Todos los valores se encuentran reportados por el IPCC [39].

Gas	Fórmula química	Vida media (años)	Eficiencia Radiativa (W ppb ⁻¹ m ⁻²)
HCFC-22	CHClF ₂	11,9	0,214
HCFC-31	CH ₂ ClF	1,2	0,068
HCFC-124	CHClFCF ₃	5,9	0,207
HCFC-133a	CH ₂ ClCF ₃	4,6	0,15
HCFC-141b	CH ₃ CCl ₂ F	9,4	0,161
HCFC-142b	CH ₃ CClF ₂	18,0	0,193

$$\frac{d[\text{HCFC}_{22}]}{dt} = \kappa_{11}[\text{HCFC}_{22}] + v_{10} \cos(\theta_{10}t) + \epsilon_6, \quad (4.29)$$

$$\frac{d[\text{HCFC}_{31}]}{dt} = \kappa_{12} \left([\text{HCFC}_{31}] - \overline{[\text{HCFC}_{31}]} \right) + v_{11} \sin(\theta_{11}t) + \epsilon_7, \quad (4.30)$$

$$\frac{d[\text{HCFC}_{124}]}{dt} = \kappa_{13} \left([\text{HCFC}_{124}] - \overline{[\text{HCFC}_{124}]} \right) + v_{12} \sin(\theta_{12}t) + \epsilon_8, \quad (4.31)$$

$$\frac{d[\text{HCFC}_{133a}]}{dt} = \kappa_{14}[\text{HCFC}_{133a}] + v_{13} \sin(\theta_{13}t + \phi_6) + \epsilon_9, \quad (4.32)$$

$$\frac{d[\text{HCFC}_{141b}]}{dt} = \kappa_{15} \left([\text{HCFC}_{141b}] - \overline{[\text{HCFC}_{141b}]} \right) + v_{14} \cos(\theta_{14}t + \phi_7) + \epsilon_{10}, \quad (4.33)$$

$$\frac{d[\text{HCFC}_{142a}]}{dt} = \kappa_{16} \left([\text{HCFC}_{142b}] - \overline{[\text{HCFC}_{142b}]} \right) + v_{15} \cos(\theta_{15}t + \phi_8) + \epsilon_{11}, \quad (4.34)$$

El conjunto de vectores $\bar{\mathbf{u}}$ obtenidos a partir del ajuste de los modelos se presenta de manera condensada en la Tabla 4.17, mientras que las soluciones gráficas correspondientes se muestran en la Figura 4.19. Esta última se emplea como punto de partida para la discusión de los resultados. Como en el caso de los CFCs la solución no ajusta del todo a los datos observacionales, particularmente en los casos del HCFC-141b y el HCFC-142b. En el primero de ellos presenta un pico máximo de porcentaje de error de aproximadamente 350 %, mientras que en el segundo gas el porcentaje de error oscila entre el 50 % y el 70 % en aproximadamente la mitad del dominio temporal considerado.

Estos valores elevados de error pueden explicarse principalmente por los valores de las concentraciones durante los primeros años de la serie temporal. A modo de ejemplo, para el HCFC-141b en el año 1992, el valor reportado por [38] es de 0.2816 ppt, mientras que el valor simulado para ese mismo año es de 1.2853 ppt. El porcentaje de error se calcula mediante la expresión

Cuadro 4.17: Conjunto de vectores solución para las Ecs. (4.29)-(4.34) que se corresponden con el mejor organismo de su respectiva simulación.

Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	v	$\theta \times 10^{-2}$	ϕ	ϵ	$[\overline{H_x}]$	SSE	R^2
HCFC-22	1960	1.23136	-2.4253	7.40704	N/A	2.08077	107.64249	812	0.99818
Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	$v \times 10^{-2}$	θ	ϕ	$\epsilon \times 10^{-2}$	$[\overline{H_x}]$	$SSE \times 10^{-2}$	R^2
HCFC-31	2000	-4.69182	4.35417	0.36065	N/A	0.31836	0.06983	0.022	0.98425
HCFC-124	2004	4.96736	3.08932	0.50564	N/A	-2.24401	1.08673	2.572	0.92982
HCFC-133a	1980	-6.33587	1.81025	0.10669	0.37877	2.15974	0.19704	2.437	0.97738
Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	v	θ	ϕ	ϵ	$[\overline{H_x}]$	SSE	R^2
HCFC-141b	1981	0.3683	0.7207	0.185	0.40339	0.71638	12.35306	78.88508	0.98079
HCFC-142b	1976	-0.72191	-0.6224	0.13877	1.92965	0.47761	10.68013	10.87374	0.997

$$\% \text{ Error} = \left(\frac{|\text{valor simulado} - \text{valor reportado}|}{\text{valor reportado}} \right) \times 100, \quad (4.35)$$

de donde se obtiene un valor de 3.564 dentro del paréntesis, lo que da como resultado un porcentaje de error de 356 %. Aunque la diferencia absoluta entre ambos valores es del orden de 1 ppt, el valor pequeño de la concentración observada aumenta considerablemente el error relativo. Este comportamiento no significa que el modelo sea inherentemente malo, sino que el error ajuste al inicio de la ventana temporal se ve progresivamente compensado hacia el final de la misma. No obstante, esta métrica es útil para poner en perspectiva la calidad del ajuste, ya que permite identificar intervalos específicos donde el modelo, pese a capturar adecuadamente la tendencia global, presenta desviaciones relativas importantes que deben ser consideradas.

Para finalizar el análisis de las métricas, el coeficiente de determinación es aceptable para la mayoría de los ajustes, con la excepción del HCFC-124, cuyo valor es de 0,93. No obstante, el porcentaje de error se mantiene por debajo del 8 %. En lo que respecta al HCFC-142b, como se mencionó anteriormente, presenta picos de error que exceden el 100 % y su R^2 es robusto. Finalmente, de los datos de los SSE, se ha determinado que el rango de desviación respecto a la media oscila entre el 3,36 % (correspondiente al HCFC-22) y el 12,08 % (correspondiente al HCFC-133a). El análisis del caso del HCFC-133a revela que, según todas las métricas, el ajuste no es del todo sólido. El coeficiente R^2 presenta una debilidad significativa, mientras que el porcentaje de error supera el 10 % en la mayor parte del dominio temporal. No obstante este caso requiere una clarificación adicional, que todos

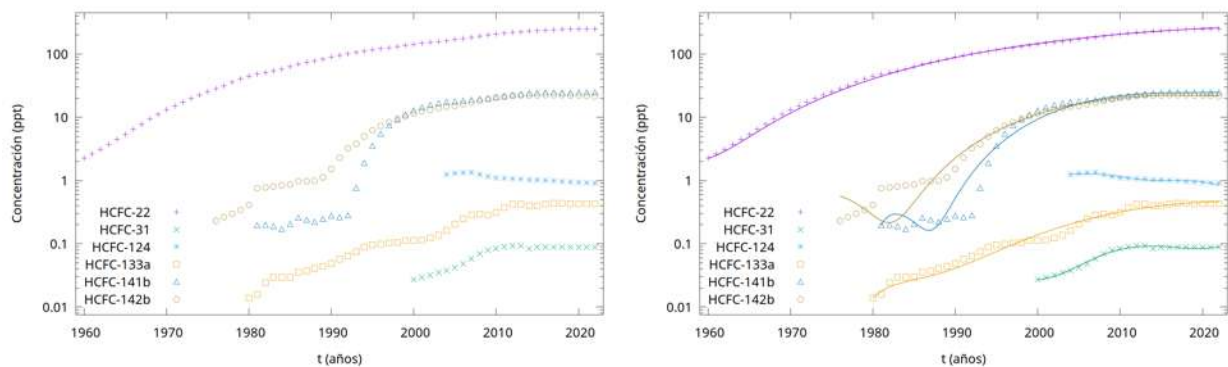


Figura 4.19: En la figura de la izquierda se muestran las concentraciones observacionales del grupo de HCFCs, mientras que en la figura derecha se encuentra la comparación entre los datos y las soluciones de las Ecs. (4.29)-(4.34), obtenidas con los valores de la Tabla 4.17. En ambas figuras se emplea escala logarítmica, y las líneas sólidas representan las soluciones correspondientes a cada gas.

los datos observacionales se encuentran por debajo de 1 ppt, por lo que, las discrepancias entre estos valores y los valores simulados pueden incrementar significativamente el error.

4.4.7. Hidrofluorocarbonos (HFCs)

Los hidrofluorocarbonos (HFCs) fueron desarrollados como sustitutos de CFCs y los HCFCs, al carecer de cloro en su estructura y, por tanto, no suponen un riesgo para la capa de ozono. Sin embargo, estos gases contribuyen al calentamiento global, un ejemplo de esto es el HFC-23, con un potencial de retención de calor 11 700 veces superior al del CO_2 [41]. Los HFCs han experimentado un consumo acelerado, pasando de prácticamente cero a una cantidad equivalente a 1200 millones de CO_2 para el año 2010 [42]. Por consiguiente, los HFCs fueron incluidos en la Enmienda de Kigali. Los gases listados en la Tabla 4.18 son algunos de los incluidos en dicha enmienda y conforman el bloque de modelos de los HFCs.

El bloque de las EDOs es el siguiente

Cuadro 4.18: Vidas medias, fórmulas químicas y eficiencias radiativas para los HFCs. Todos los valores se encuentran reportados por el IPCC [39].

Gas	Fórmula química	Vida media (años)	Eficiencia Radiativa (W ppb ⁻¹ m ⁻²)
HFC-23	CHF ₃	228,0	0,191
HFC-32	CH ₂ F ₂	5,4	0,111
HFC-43-10mee	CF ₃ CHFCHCF ₂ CF ₃	17,0	0,357
HFC-125	CHF ₂ CF ₃	30,0	0,234
HFC-134a	CH ₂ FCF ₃	14,0	0,167
HFC-143a	CH ₃ CF ₃	51,0	0,168
HFC-152a	CH ₃ CHF ₂	1,6	0,102
HFC-227ea	CF ₃ CHFCF ₃	36,0	0,273
HFC-236fa	CF ₃ CH ₂ CF ₃	213,0	0,251
HFC-245fa	CHF ₂ CH ₂ CF ₃	7,9	0,245

$$\frac{d[\text{HFC}_{23}]}{dt} = \kappa_{17} \left([\text{HFC}_{23}] - \overline{[\text{HFC}_{23}]} \right) + v_{16} \cos(\theta_{16}t) + \epsilon_{12}, \quad (4.36)$$

$$\frac{d[\text{HFC}_{32}]}{dt} = \kappa_{18} \left([\text{HFC}_{32}] - \overline{[\text{HFC}_{32}]} \right) + v_{17} \cos(\theta_{17}t) + \epsilon_{13}, \quad (4.37)$$

$$\frac{d[\text{HFC}_{43-10}]}{dt} = \kappa_{19} \left([\text{HFC}_{43-10}] - \overline{[\text{HFC}_{43-10}]} \right) + v_{18} \sin(\theta_{18}t) + \epsilon_{14}, \quad (4.38)$$

$$\frac{d[\text{HFC}_{125}]}{dt} = \kappa_{20} \left([\text{HFC}_{125}] - \overline{[\text{HFC}_{125}]} \right) + v_{19} \sin(\theta_{19}t) + \epsilon_{15}, \quad (4.39)$$

$$\frac{d[\text{HFC}_{134a}]}{dt} = \kappa_{21} \left([\text{HFC}_{134a}] - \overline{[\text{HFC}_{134a}]} \right) + v_{20} \sin(\theta_{20}t) + \epsilon_{16}, \quad (4.40)$$

$$\frac{d[\text{HFC}_{143a}]}{dt} = \kappa_{22} \left([\text{HFC}_{143a}] - \overline{[\text{HFC}_{143a}]} \right) + v_{21} \sin(\theta_{21}t) + \epsilon_{17}, \quad (4.41)$$

$$\frac{d[\text{HFC}_{152a}]}{dt} = \kappa_{23} \left([\text{HFC}_{152a}] - \overline{[\text{HFC}_{152a}]} \right) + v_{22} \sin(\theta_{22}t) + \epsilon_{18}, \quad (4.42)$$

$$\frac{d[\text{HFC}_{227ea}]}{dt} = \kappa_{24} \left([\text{HFC}_{227ea}] - \overline{[\text{HFC}_{227ea}]} \right) + \eta_1 t + \epsilon_{19}, \quad (4.43)$$

$$\frac{d[\text{HFC}_{236ea}]}{dt} = \kappa_{25} \left([\text{HFC}_{236ea}] - \overline{[\text{HFC}_{236ea}]} \right) + \eta_2 t + \epsilon_{20}, \quad (4.44)$$

$$\frac{d[\text{HFC}_{245fa}]}{dt} = \kappa_{26} \left([\text{HFC}_{245fa}] - \overline{[\text{HFC}_{245fa}]} \right) + \eta_3 t + \epsilon_{21}, \quad (4.45)$$

en este conjunto de gases las EDOs modelan la media de la concentración de cada gas. Los vectores $\bar{\mathbf{u}}$ se pueden observar en la Tabla 4.19. Para obtener los parámetros en el Mulo se emplearon las siguientes funciones: el método de cruzamiento fue SBX en todos los casos, dos métodos de mutación fueron empleados: mutación uniforme para HFC-32, HFC-43-10mee, HFC-125, HFC-152a, HFC-227ea, HFC-236ea y HFC-245fa y mutación no uniforme para HFC-23, HFC-134a y HFC-143a. Con respecto a las funciones de fortaleza, se utilizó una combinación de dos funciones: MAE/RMSE para HFC-23, HFC-32, HFC-43-10mee. HFC-

Cuadro 4.19: Conjunto de vectores solución para las Ecs. (4.36)-(4.45) que se corresponden con el mejor organismo de su respectiva simulación.

Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	v	θ	ϵ	η	$[\overline{H_x}]$	SSE	R^2
HFC-23	1960	3.27667	0.11063	0.12283	0.58975	N/A	12.27173	0.785	0.99989
HFC-32	1980	17.34	-0.01262	0.11785	0.72467	N/A	4.40158	23.31989	0.99
HFC-43-10mee	1988	1.09755	0.85037	0.31674	0.0099	N/A	0.12728	0.00144	0.99677
HFC-125	1980	9.7242	0.28385	0.11302	0.96222	N/A	7.73831	1.139	0.99978
HFC-134a	1980	3.25661	1.77868	0.13529	2.82326	N/A	35.67607	56.366	0.99919
HFC-143a	1981	8.62642	0.15367	-0.1306	0.78162	N/A	7.62794	28.306	0.99133
HFC-152a	1986	-1.86475	0.24751	-0.19029	0.20814	N/A	3.5604	2.502	0.99148
Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	v	θ	ϵ	$\eta \times 10^{-4}$	$[\overline{H_x}]$	SSE	R^2
HFC-227ea	1975	10.7132	N/A	N/A	-0.31218	1.79609	0.422	0.119	0.99258
HFC-236fa	1970	9.63458	N/A	N/A	0.00224	0.01252	0.048	0.0078	0.96951
HFC-245fa	2004	6.60655	N/A	N/A	0.5322	-1.65386	1.931	0.09	0.99592

125, HFC-236ea y HFC-245fa, para el resto de gases la combinación de funciones de fortaleza fue sMAPE/RMSE.

Las soluciones y sus respectivos datos observacionales se presentan en la Figura 4.20. Al igual que en el caso de los HCFCs, la discusión de los resultados comenzará con esta figura y los porcentajes de error obtenidos. El porcentaje máximo de error obtenido fue de aproximadamente 900 % para el HFC-236fa, lo que representa el peor ajuste dentro del bloque de los HFCs. Este valor también se ve acompañado del coeficiente de determinación más bajo (0,969) y el porcentaje de variación más alto en relación con la media, alcanzando un 23,92 %. Además del pico mencionado, se identifican otros de 550 % para el HFC-32, 325 % para el HFC-134a y 700 % para el HFC-227ea, sin que estas variaciones afecten a las demás métricas. Como se ha mencionado anteriormente, estos picos de error se atribuyen a la relación entre el valor de la concentración y el porcentaje de error. Cuanto menos es el valor de la concentración, el porcentaje de error aumenta de manera significativa.

No obstante, el resto de las métricas sugieren un ajuste aceptable para el resto de gases, donde el coeficiente R^2 se aproxima a la unidad y el porcentaje de variación respecto a la media fluctúa entre el 0,9 % (HFC-23) y el 11,82 % (HFC-227ea), con excepción del HFC-32, cuyo porcentaje es del 16,73 %.

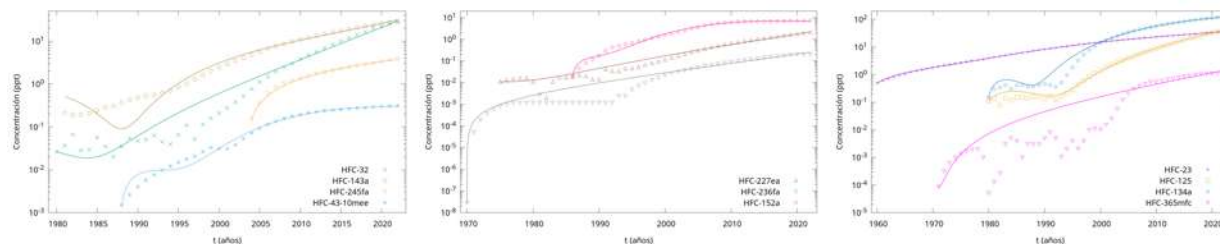


Figura 4.20: En la figura de la izquierda se muestran las concentraciones observacionales del grupo de HFCs, mientras que en la figura derecha se encuentra la comparación entre los datos y las soluciones de las Ecs. (4.36)-(4.45), obtenidas con los valores de la Tabla 4.19. En ambas figuras se emplea escala logarítmica, y las líneas sólidas representan las soluciones correspondientes a cada gas.

4.4.8. Perfluorocarbonos (PFCs)

Los perfluorocarbonos (PFCs) son especies compuestas únicamente de carbono y flúor, con la siguiente fórmula química: C_xF_y . Estos productos cuentan con una amplia gama de aplicaciones, que incluyen lubricantes para CDs, refrigerantes para supercomputadoras y anestésicos [43]. Del grupo de PFCs, el más abundante de ellos el CF_4 (PFC-14), con una concentración estimada de 86,4 ppt en el año 2020 [44]. Este compuesto, que posee fuentes naturales como sintéticas [45], mediante el análisis del hielo antártico, se ha estimado una concentración preindustrial para el CF_4 de 34 ± 1 ppt [46]. Otro PFC de interés es el PFC-318 empleado en la industria electrónica, que puede generarse como subproducto de la fabricación del politetrafluoroetileno (PTFE) [47], un compuesto ampliamente utilizado y conocido como teflón. Se han detectado otros PFC con concentraciones inferiores a 1 ppt [48].

Dentro del grupo de los PFC, se incluyen otras especies fluorinadas, tales como el trifluoruro de nitrógeno (NF_3), el hexafluoruro de azufre (SF_6) y el fluoruro de sulfirilo (SO_2F_2). El NF_3 utilizado en la fabricación de semiconductores ha experimentado un incremento en su concentración, alcanzando los 2,3 ppt para el año 2020 [49]. El SO_2F_2 se utiliza principalmente como sustituto del bromuro de metilo (CH_3Br), donde su concentración ha experimentado un incremento del 18 % entre 2016 y 2020 [50]. El incremento se atribuye al uso del SO_2F_2 como tratamiento posterior a la cosecha de alimentos. En última instancia, el SF_6 , empleado en la manufactura de semiconductores y primordialmente como gas dieléctrico, ha alcanzado

Cuadro 4.20: Vida media, fórmula química y eficiencias radiativas para PFCs seleccionados y otras especies fluorinadas. Los datos provienen de [38].

Gas	Fórmula química	Vida media (años)	Eficiencia Radiativa (W ppb ⁻¹ m ⁻²)
PFC-14	CF ₄	50 000	0,099
PFC-116	C ₂ F ₆	10 000	0,261
PFC-218	C ₃ F ₈	2600	0,270
PFC-31-10	C ₄ F ₁₀	2600	0,369
PFC-41-12	C ₅ F ₁₂	4100	0,408
PFC-51-14	C ₆ F ₁₄	3100	0,449
PFC-61-16	C ₇ F ₁₆	3000	0,503
PFC-71-18	C ₈ F ₁₈	3000	0,558
PFC-318	c - C ₄ F ₈	3200	0,314
Trifloruro de nitrógeno	NF ₃	569	0,204
Hexafloruro de azufre	SF ₆	1000	0,567
Fluoruro de sulfurilo	SO ₂ F ₂	36	0,211

una concentración de 12 ppt para el mes de febrero de 2025 [32].

Todos los gases que componen el bloque de PFCs se encuentran en la Tabla 4.20, de esta tabla se desprende que la vida media de gran parte de estos gases es de milenios. El conjunto de EDOs que modelan cada uno de estos GHG son las siguientes

$$\frac{d[\text{PFC}_{14}]}{dt} = \kappa_{27} \left([\text{PFC}_{14}] + \overline{[\text{PFC}_{14}]} \right) + v_{23} \cos(\theta_{23}t + \phi_9) + \epsilon_{22}, \quad (4.46)$$

$$\frac{d[\text{PFC}_{31-10}]}{dt} = \kappa_{28} [\text{PFC}_{31-10}] + v_{24} \cos(\theta_{24}t + \phi_{10}) + \epsilon_{23}, \quad (4.47)$$

$$\frac{d[\text{PFC}_{41-12}]}{dt} = \kappa_{29} [\text{PFC}_{41-12}] + v_{25} \cos(\theta_{25}t + \phi_{11}) + \epsilon_{24}, \quad (4.48)$$

$$\frac{d[\text{PFC}_{51-14}]}{dt} = \kappa_{30} [\text{PFC}_{51-14}] + v_{26} \cos(\theta_{26}t + \phi_{12}) + \epsilon_{25}, \quad (4.49)$$

$$\frac{d[\text{PFC}_{61-16}]}{dt} = \kappa_{31} [\text{PFC}_{61-16}] + v_{27} \cos(\theta_{27}t + \phi_{13}) + \epsilon_{26}, \quad (4.50)$$

$$\frac{d[\text{PFC}_{71-18}]}{dt} = \kappa_{32} \left([\text{PFC}_{71-18}] + \overline{[\text{PFC}_{71-18}]} \right) + v_{28} \cos(\theta_{28}t + \phi_{14}) + \epsilon_{27}, \quad (4.51)$$

$$\frac{d[\text{PFC}_{116}]}{dt} = \kappa_{33} [\text{PFC}_{116}] + v_{29} \cos(\theta_{29}t) + \epsilon_{28}, \quad (4.52)$$

$$\frac{d[\text{PFC}_{218}]}{dt} = \kappa_{34} [\text{PFC}_{218}] + v_{30} \cos(\theta_{30}t + \phi_{15}) + \epsilon_{29}, \quad (4.53)$$

$$\frac{d[\text{PFC}_{318}]}{dt} = \kappa_{35} \left([\text{PFC}_{318}] + \overline{[\text{PFC}_{318}]} \right) + v_{31} \cos(\theta_{31}t + \phi_{16}) + \epsilon_{30}, \quad (4.54)$$

$$\frac{d[\text{NF}_3]}{dt} = \kappa_{36} [\text{NF}_3] + v_{32} \sin(\theta_{32}t) + \epsilon_{31}, \quad (4.55)$$

$$\frac{d[\text{SF}_6]}{dt} = \kappa_{37} [\text{SF}_6] + v_{33} \sin(\theta_{33}t) + \epsilon_{32}, \quad (4.56)$$

$$\frac{d[\text{SO}_2\text{F}_2]}{dt} = \kappa_{38} \left([\text{SO}_2\text{F}_2] - \overline{[\text{SO}_2\text{F}_2]} \right) + v_{34} \sin(\theta_{34}t) + \epsilon_{33}, \quad (4.57)$$

los valores de los parámetros que dan solución de cada uno de los modelos se presentan de

Cuadro 4.21: Vectores $\bar{\mathbf{u}}$ que dan solución a las Ecs. (4.46)-(4.57). Cada solución se corresponde con el mejor organismo obtenido de su correspondiente simulación.

Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	$v \times 10^{-3}$	θ	ϕ	$\epsilon \times 10^{-3}$	$[\overline{H_x}]$	$SSE \times 10^{-4}$	R^2
PFC-31-10	1972	0.91195	1.97032	0.15253	10.4386	3.56734	0.107	1.237	0.99949
PFC-41-12	1969	1.11766	1.67681	0.15783	-0.08782	2.43871	0.074	2.189	0.99848
PFC-51-14	1969	1.43101	3.86343	0.14828	0.24959	5.14623	0.175	6.454	0.99921
PFC-61-16	1965	1.95789	-1.56744	0.13882	2.95581	1.54706	0.051	1.848	0.9984
PFC-71-18	1969	-16.71795	8.21363	0.08229	-14.77323	1.05288	0.046	12.28	0.98359
Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	$v \times 10^{-2}$	θ	ϕ	$\epsilon \times 10^{-2}$	$[\overline{H_x}]$	$SSE \times 10^{-2}$	R^2
PFC-218	1960	-9.0309	4.19027	0.05497	20.52617	4.34517	0.245	1.593	0.99562
PFC-318	1962	1.68616	1.31592	0.15869	0.13476	3.04262	0.792	2.526	0.99858
Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-3}$	v	θ	ϕ	ϵ	$[\overline{H_x}]$	SSE	R^2
PFC-14	1960	6.85331	0.38479	0.15147	1.23112	0.83793	62.954	21.655	0.99852
Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	$v \times 10^{-2}$	θ	ϕ	$\epsilon \times 10^{-2}$	$[\overline{H_x}]$	SSE	R^2
PFC-116	1960	1.96482	3.27713	0.12006	N/A	3.32287	2.383	0.111	0.99924
NF ₃	1979	11.1832	-0.75668	0.1906	N/A	0.58283	0.565	0.029	0.99885
SF ₆	1960	3.77224	-4.58825	0.13188	N/A	5.39365	3.603	0.159	0.99977
SO ₂ F ₂	1963	3.18997	-1.62333	-0.19735	N/A	4.72731	0.932	0.109	0.99732

forma resumida en la Tabla 4.21. A partir de estos valores pueden extraerse las primeras conclusiones: dado que este grupo de gases no se encuentra sujeto a un control tan estricto como los anteriores grupos de halocarbonos, sus concentraciones muestran una tendencia creciente a lo largo del tiempo. Este comportamiento se refleja en el parámetro κ , cuyo signo positivo en casi todos los casos, reproduce adecuadamente la evolución observada en los datos experimentales. Las únicas excepciones corresponden a los PFC-71-18 y PFC-218, cuya discrepancia podría estar asociada a la presencia de una solución degenerada del modelo.

Para obtener los vectores $\bar{\mathbf{u}}$ en todos los casos, el método de cruzamiento empleado fue SBX, mientras que la técnica de mutación utilizada fue la mutación uniforme. En todas las simulaciones se implementaron dos funciones de fortaleza, con tres en distintos pares: MAPE/MAE para PFC-14, PFC-31-10, PFC-51-14, PFC-61-16 y PFC-318. La combinación sMAPE/RMSE se ha empleado en combinación con PFC-71-18 y PFC-218. Finalmente, para el resto de gases, se empleó la combinación de funciones MAE/RMSE.

En este bloque de gases, las soluciones presentan ajustes satisfactorios, como se observa en la Figura 4.21, aun cuando se registran picos de error superiores al 200 %. Dichos porcentajes elevados se asocian a concentraciones menores a 1 ppt, por lo que no afectan de

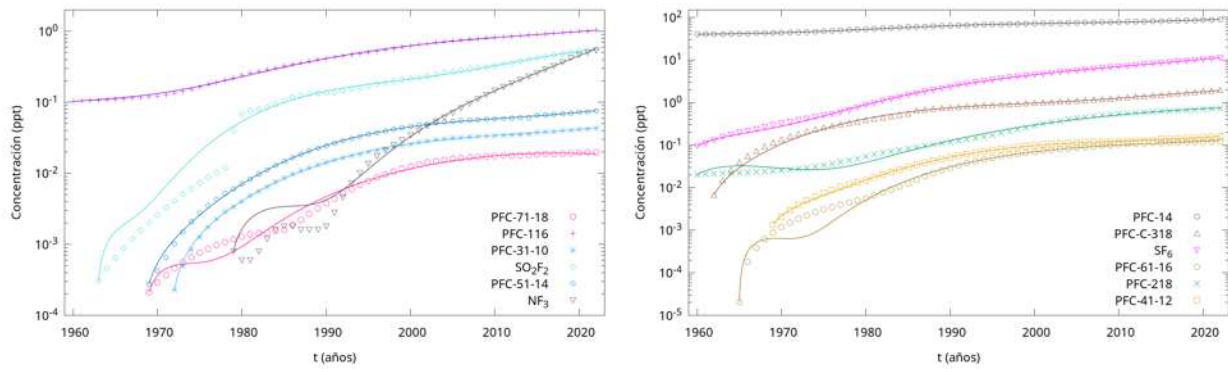


Figura 4.21: En la figura de la izquierda se muestran las concentraciones observacionales del grupo de PFCs, mientras que en la figura derecha se encuentra la comparación entre los datos y las soluciones de las Ecs. (4.46)-(4.57), obtenidas con los valores de la Tabla 4.21. En ambas figuras se emplea escala logarítmica, y las líneas sólidas representan las soluciones correspondientes a cada gas.

Cuadro 4.22: Vida media, eficiencias radiativas y fórmulas químicas para sustancias cloro-carbonadas seleccionadas. Los datos provienen de [37].

Gas	Fórmula química	Vida media (años)	Eficiencia Radiativa ($\text{W ppb}^{-1} \text{ m}^{-2}$)
Tetracloruro de carbono	CCl_4	32,0	0,166
Cloruro de metilo	CH_3Cl	0,9	0,005
Cloruro de metileno	CH_2Cl_2	0,493	0,029
Cloroformo	CHCl_3	0,501	0,074

manera significativa al desempeño global del modelo ni al resto de las métricas de error. En particular, los valores del coeficiente de determinación R^2 resultan altamente robustos, con valores cercanos a 0,999 para la gran mayoría de los gases analizados. Asimismo, el porcentaje de error relativo a la media de los datos oscila entre 0.93 % y 6.47 %. El ajuste más débil corresponde al PFC-71-18, el cual presenta una desviación relativa respecto a la media del 10.38 % y un valor $R^2 = 0,98$.

4.4.9. Clorocarbonos

Al retomar el tema de las ODS, se aborda el grupo de los clorocarbonos, compuestos químicos que contienen carbono, hidrógeno y cloro en su estructura. Este grupo está compuesto por cuatro gases: tetracloruro de carbono (CCl_4), cloruro de metilo (CH_3Cl), cloruro de metileno (CH_2Cl_2) y cloroformo (CHCl_3). La Tabla 4.22, presenta la vida media de cada uno de estos gases.

El CCl_4 es una sustancia altamente tóxica que conlleva efectos adversos para la salud [51], y es un gas de efecto invernadero considerable. En virtud del Protocolo de Montreal, su producción se ha restringido a usos esenciales [52], lo que ha ocasionado una disminución en su concentración, la cual se estima en 76,3 ppt para el año 2020 [49].

El resto de las sustancias incluidas en la Tabla 4.22 se clasifican en un subgrupo denominado «sustancias de vida muy corta» (VSLs,^v por sus siglas en inglés). Estas sustancias se caracterizan por poseer períodos de vida breves, inferiores a un seis meses, y poseer un elevado potencial de desgastar la capa de ozono. El CH_3Cl es el de mayor concentración en el grupo, con una concentración de 556 ppt para el año 2020 [49]. Este compuesto no se encuentra regulado por el Protocolo de Montreal, debido a que su origen es mayormente natural [53], y su contribución al calentamiento global es mínima.

Por otro lado, la concentración de CH_2Cl_2 ha experimentado un crecimiento constante [49]. Se estima que cerca del 90 % de las emisiones son de origen antropogénico [54]. De acuerdo con datos reportados por AGAGE [55],^{vi} se ha producido una disminución progresiva en la concentración de CHCl_3 , pasando de 9,0 ppt en 2016 a 8,7 ppt en 2020. En la actualidad, la fuente principal de emisión de CHCl_3 se desconoce. Sin embargo, se estima que las emisiones antropogénicas podrían oscilar entre un 10 % [56] y un 50 % [57].

El bloque de EDOs que modelan al grupo de sustancias clorocarbonadas son como sigue

$$\frac{d[\text{CCl}_4]}{dt} = \kappa_{39} \left([\text{CCl}_4] - \overline{[\text{CCl}_4]} \right) + v_{35} \sin(\theta_{35}t) + \epsilon_{34}, \quad (4.58)$$

$$\frac{d[\text{CH}_2\text{Cl}_2]}{dt} = \kappa_{40} \left([\text{CH}_2\text{Cl}_2] - \overline{[\text{CH}_2\text{Cl}_2]} \right) + v_{36} \sin(\theta_{36}t) + \epsilon_{35}, \quad (4.59)$$

$$\frac{d[\text{CH}_3\text{Cl}]}{dt} = \kappa_{41} \left([\text{CH}_3\text{Cl}] - \overline{[\text{CH}_3\text{Cl}]} \right) + v_{37} \sin(\theta_{37}t) + \epsilon_{36}, \quad (4.60)$$

$$\frac{d[\text{CHCl}_3]}{dt} = \kappa_{42} \left([\text{CHCl}_3] - \overline{[\text{CHCl}_3]} \right) + v_{38} \sin(\theta_{38}t) + \epsilon_{37}, \quad (4.61)$$

Los valores que componen los vectores solución se presentan en la Tabla 4.23. De dicha tabla se desprende que el parámetro κ es positivo únicamente para el CH_2Cl_2 , en concordancia con lo descrito previamente, ya que se trata del único gas de este bloque cuya concentración

^v *Very short-lived substances.*

^{vi} *Advanced Global Atmospheric Gases Experiment*

Cuadro 4.23: Valores obtenidos para los parámetros que dan solución a las Ecs. (4.58)-(4.61), caja vector $\bar{\mathbf{u}}$ se corresponde con ADN del mejor organismo de cada simulacion.

Gas	$t(0)$	κ	ν	θ	ϵ	$[\overline{H_x}]$	SSE	R^2
CCl_4	1960	-0.12499	2.19496	0.1021	0.40844	87.482	48.967	0.99579
CH_3Cl	1960	-0.14006	0.92886	0.12478	0.53993	542.876	1200	0.77873
CH_2Cl_2	1960	0.04242	0.32251	0.11919	0.50734	21.809	71.869	0.98362
CHCl_3	1960	-0.29515	0.46576	0.16228	0.09408	8.275	5.647	0.92586

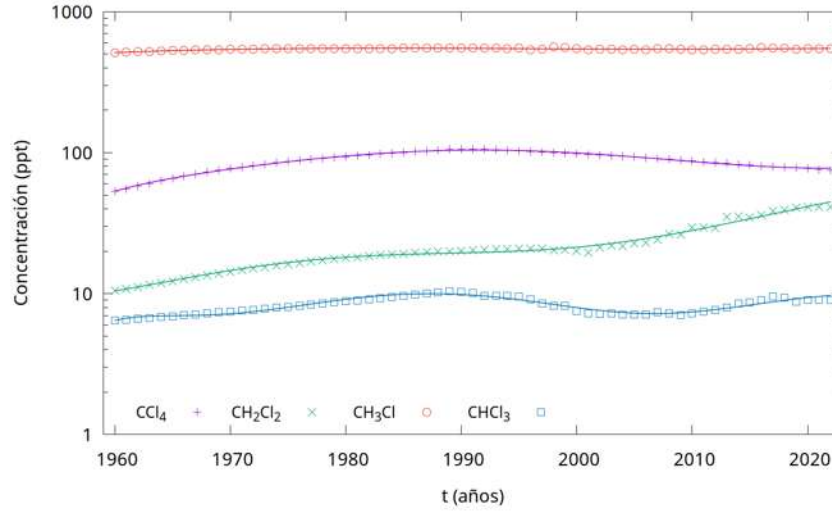


Figura 4.22: En la figura de la izquierda se muestran las concentraciones observacionales del grupo de los clorocarbonos mientras que en la figura derecha se encuentra la comparación entre los datos y las soluciones de las Ecs. (4.58)-(4.61), obtenidas con los valores de la Tabla 4.23. En ambas figuras se emplea escala logarítmica, y las líneas sólidas representan las soluciones correspondientes a cada gas.

muestra una tendencia creciente. Por otra parte, los valores del coeficiente de determinación resultan notablemente bajos para la mayoría de los compuestos analizados, con la excepción del CCl_4 .

Al contrastar las soluciones del modelo con sus respectivas series temporales, como se muestra en la Figura 4.22, se observan ajustes satisfactorios para el grupo de gases. El resto de métricas corroboran el buen ajuste obtenido para este bloque de gases, donde el porcentaje de error se mantiene por debajo del 12%, mientras que el porcentaje de variación respecto a la media de los datos observacionales oscila entre el 0.8% y el 4.9%.

Cuadro 4.24: Vida media, fórmulas químicas y eficiencias radiativas de especies químicas seleccionadas con bromo en su estructura. La información se encuentra reportada en [38].

Gas	Fórmula química	Vida media (años)	Eficiencia Radiativa (W ppb ⁻¹ m ⁻²)
Bromuro de metilo	CH ₃ Br	0,8	0,004
Halón-1211	CBrClF ₂	16,0	0,3
Halón 1301	CBrF ₃	72,0	0,299
Halón-2402	CBrF ₂ CBrF ₂	28,0	0,312

4.4.10. Halones

El último grupo de especies químicas estudiadas son las que se caracterizan por la presencia de bromo en lugar de cloro en su estructura. Dentro de este grupo, destacan los halones, que se emplean comúnmente en extintores. Además de los halones, otro compuesto que contiene bromo en su estructura es el bromuro de metilo (CH₃Br), que representa casi la mitad de las emisiones de bromo a la atmósfera [58]. El CH₃Br presenta fuentes de emisión tanto de origen antropogénico como natural [59]. El átomo de bromo exhibe una eficacia entre 20 y 50 veces superior a la del cloro en la erosión de la capa de ozono, aunque solo en circunstancias específicas [58].

Es por lo anterior que todas estas sustancias se encuentran reguladas por el Protocolo de Montreal. Esta medida ha resultado en una disminución de su concentración atmosférica. En el caso de los halones el pico de las concentraciones se alcanzó alrededor de los años 2000. La vida media de los halones se extiende a lo largo es de decenas de años, mientras que la del CH₃Br es de menos de un año. Esta información se encuentra en la Tabla 4.24 junto con otra información relevante relacionada con este grupo de ODS.

Las EDOs que modelan las concentraciones de los hidrocarburos que contienen bromo son las siguientes

$$\frac{d[\text{CH}_3\text{Br}]}{dt} = \kappa_{43} \left([\text{CH}_3\text{Br}] - \overline{[\text{CH}_3\text{Br}]} \right) + v_{39} \sin(\theta_{39}t) + \epsilon_{38}, \quad (4.62)$$

$$\frac{d[\text{Halon}_{1211}]}{dt} = \kappa_{44} \left([\text{Halon}_{1211}] - \overline{[\text{Halon}_{1211}]} \right) + v_{40} \cos(\theta_{40}t) + \epsilon_{39}, \quad (4.63)$$

$$\frac{d[\text{Halon}_{1301}]}{dt} + \kappa_{45} \left([\text{Halon}_{1301}] - \overline{[\text{Halon}_{1301}]} \right) + v_{41} \cos(\theta_{41}t) + \epsilon_{40}, \quad (4.64)$$

$$\frac{d[\text{Halon}_{2402}]}{dt} = \kappa_{46} [\text{Halon}_{2402}] + v_{42} \cos(\theta_{42}t) + \epsilon_{41}, \quad (4.65)$$

Cuadro 4.25: Vectores $\bar{\mathbf{u}}$ que dan soluciones las Ecs. (4.62)-(4.65). Cada vector se corresponde con el ADN del mejor organismo de cada simulación.

Gas	$t(0)$	κ	v	θ	$\epsilon \times 10^{-2}$	$[\overline{H_x}]$	SSE	R^2
CH ₃ Br	1960	-0.44666	0.5099	0.12386	9.2011	7.631	2.597	0.9441
Gas	$t(0)$	$\kappa \times 10^{-2}$	$v \times 10^{-2}$	$\theta \times 10^{-2}$	$\epsilon \times 10^{-2}$	$[\overline{H_x}]$	SSE	R^2
Halon-1211	1960	-2.53669	13.94584	12.93639	7.6349	2.198	0.132	0.99925
Halon-1301	1970	-0.73073	7.29475	16.18144	7.79803	2.022	0.451	0.99466
Halon-2402	1968	-3.86644	1.29492	0.14921	2.18607	0.322	0.0037	0.99746

de igual manera que ocurre en el caso de los clorocarbonos, el parámetro κ exhibe un valor negativo en todos los casos lo que es consistente con la disminución de la concentración atmosférica reportada. El resto de los valores se presentan en la Tabla 4.25. Para alcanzar los valores mencionados con el Mulo, se implementó el método de cruzamiento SBX ($\eta = 2$) y mutación uniforme en todas las simulaciones. En lo que respecta a las funciones de fortaleza, se implementó la combinación MAE/RMSE para los cuatro gases.

La Figura 4.23 muestra el ajuste obtenido para cada gas de este bloque. De los ajustes se desprenden porcentajes de error cercano al 500 % para el Halon-1301 y cercano al 800 % para el Halon-1211, estos porcentajes disminuyen progresivamente durante la primera década de cada ventana de tiempo y se mantienen debajo del 12 % el resto del tiempo. Los coeficientes de determinación son buenos con la excepción del CH₃Br ($R^2 = 0,944$), los porcentajes de desviación respecto a la media van desde el 2,09 % al 4,56 % respaldando el buen ajuste para este grupo de ODS.

4.5. Eficiencia Radiativa

Hasta el momento, la totalidad de los modelos se han enfocado en las emisiones y concentraciones de los GHG. Sin embargo, estos datos, por sí solos, no nos aportan información alguna sobre el calentamiento global. Con el propósito de identificar las repercusiones que cada gas tiene en la temperatura terrestre, haremos uso del concepto de forzamiento radiativo (RF,^{vii} por sus siglas en inglés). En primer lugar, es preciso señalar que el RF no es un

^{vii} *Radiative forcing*

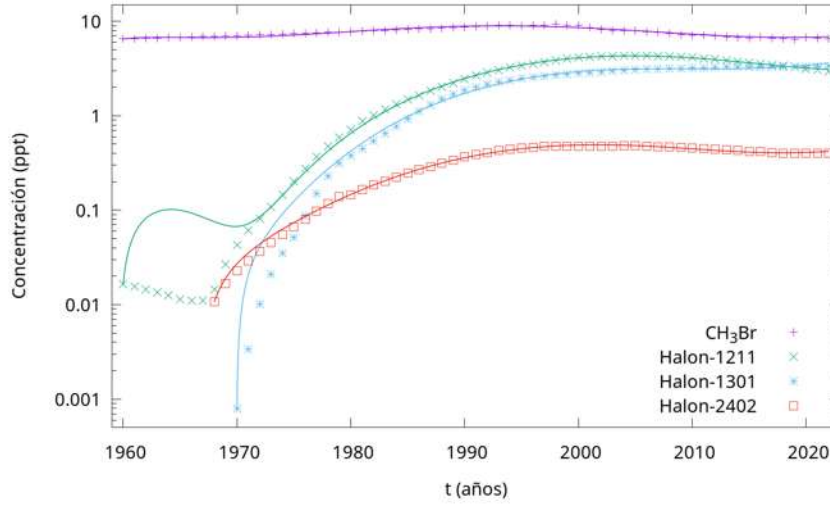


Figura 4.23: En la figura de la izquierda se muestran las concentraciones observacionales del grupo de los clorocarbonos mientras que en la figura derecha se encuentra la comparación entre los datos y las soluciones de las Ecs. (4.62)-(4.65), obtenidas con los valores de la Tabla 4.25. En ambas figuras se emplea escala logarítmica, y las líneas sólidas representan las soluciones correspondientes a cada gas.

elemento tangible como lo es la concentración atmosférica. Por consiguiente, no es posible realizar mediciones directas del RF. Este es un concepto que se estima a partir de mediciones de parámetros en la atmósfera, como la fracción molar de los gases de efecto invernadero.

El IPCC, en su informe AR5 [60], define el RF como el cambio en el balance energético de la Tierra ocasionado por perturbaciones como los GHG y los aerosoles. El balance energético representa la diferencia entre la energía solar que ingresa y la energía que abandona la atmósfera. Esta magnitud se expresa comúnmente en watts por metro cuadrado (W/m^2). El equilibrio radiativo de un planeta se logra mediante un flujo de energía neto de cero, lo que implica que la energía recibida es equivalente a la energía emitida [61]. En otras palabras, el planeta se encuentra en equilibrio con su estrella madre y el espacio circundante.

4.5.1. Eficiencia radiativa efectiva

Los ajustes rápidos en la troposfera poseen la capacidad de mitigar o amplificar las perturbaciones del flujo de energía, lo cual podría dar lugar a diferencias en el forzamiento. Por lo tanto, el RF no constituye un indicador preciso del cambio de temperatura para todos los agentes de forzamiento. Es por ello que es pertinente considerar el forzamiento

radiativo efectivo (ERF,^{viii} por sus siglas en inglés). El ERF se define como el cambio neto del flujo radiativo en la atmósfera superior, una vez que se han adaptado la temperatura de la atmósfera, el vapor de agua y las nubes.

4.6. Cálculo del ERF

El cálculo del ERF se lleva a cabo siguiendo las expresiones mostradas en la Tabla 4.26. Como se muestra en la tabla, las fórmulas incluyen factores de escala para convertir RF a ERF, relacionados con los principales GHG: dióxido de carbono (CO_2), óxido nitroso (N_2O) y metano (CH_4) [62]. La implementación de los factores de escala de RF a ERF también se lleva a cabo para tres gases halogenados: el CFC-11 (0,927), el CFC-12 (0,97) y el Halon-1211 (0,937) [63]. Además de los factores de escala, a cada gas halogenado le corresponde un valor de eficiencia radiativa (RE,^{ix} por sus siglas en inglés). La RE representa la variación en el forzamiento radiativo por cambio en una unidad en la concentración del gas. Para los halocarbonos, los valores se comunican generalmente en unidades de $\text{W m}^{-2} \text{ ppm}^{-1}$. La disparidad en la absorción de la intensidad de la longitud de onda en el espectro infrarrojo constituye el factor determinante que confiere a cada gas su valor de RE característico [63].

Empleando las concentraciones obtenidas a partir de los modelos discutidos en secciones previas, junto con las expresiones simplificadas correspondientes, se procede a calcular la ERF de cada uno de los 48 gases considerados, organizados en siete grupos: principales GHG (3), CFCs (9), HCFCs (6), HFCs (10), PFCs (12), clorocarbonos (4) y halones (4). El cambio total en el ERF para el año 2022 relativo a 1750, es 3.468 W m^{-2} . De este valor 2.288 W m^{-2} corresponden a CO_2 , 0.561 W m^{-2} a CH_4 , 0.211 W m^{-2} a N_2O , 0.256 W m^{-2} a los CFCs, 0.064 W m^{-2} a los HCFCs, 0.048 W m^{-2} a los HFCs, 0.019 W m^{-2} a los PFCs, 0.002 W m^{-2} a los halones y 0.018 W m^{-2} a los clorocarbonos. La Figura 4.24 presenta la evolución del cambio en la ERF para cada grupo de gases en el periodo 1960-2022.

El CO_2 es el principal contribuyente al ERF, con un 65,97 %, seguido del CH_4 , cuya

^{viii} *Effective radiative forcing*

^{ix} *Radiative efficiency*

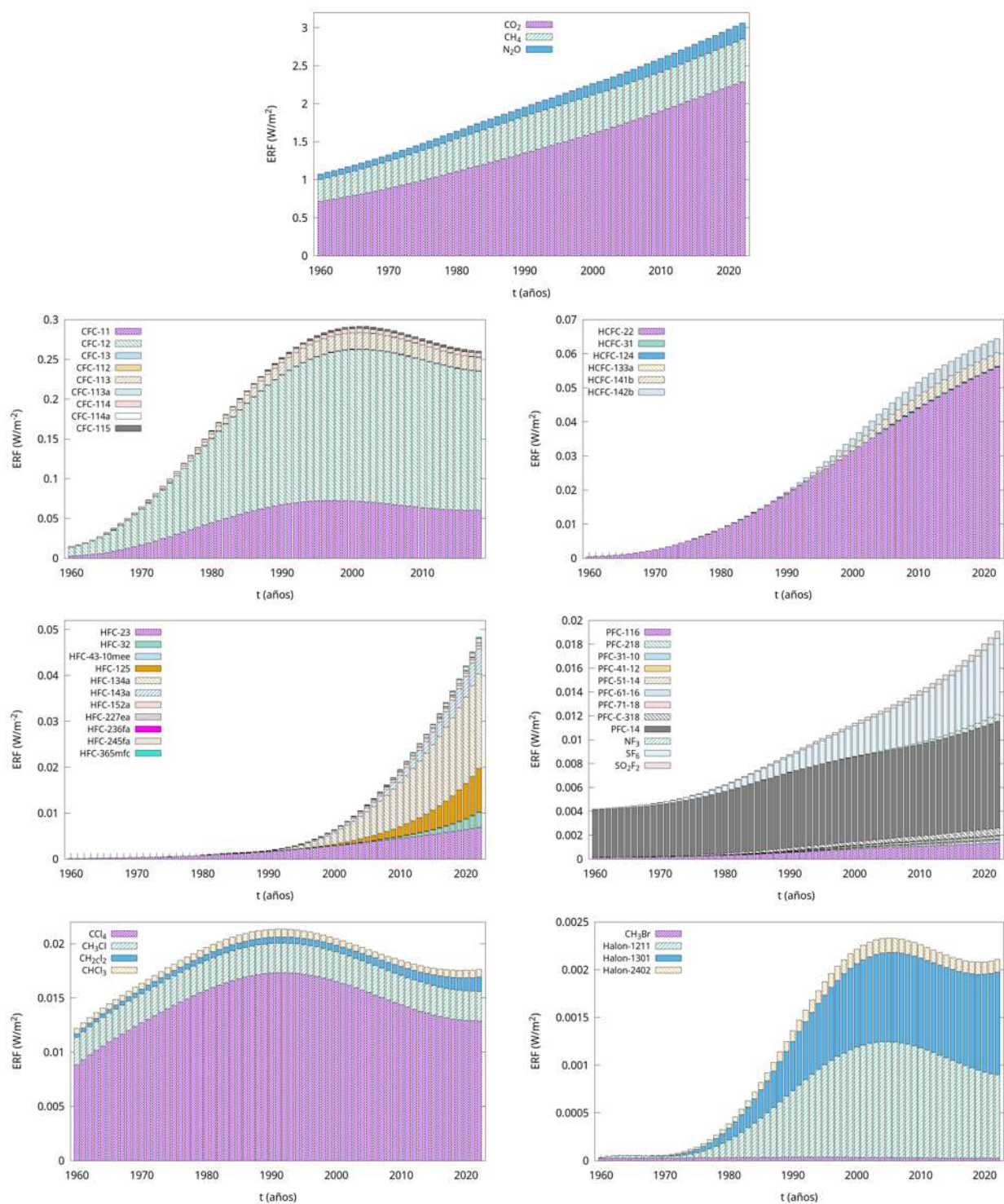


Figura 4.24: Evolución del ERF para 48 GHG, clasificados en siete grupos: principales GHG, CFCs, HCFCs, HFCs, PFCs, clorocarbonos y halones. Las contribuciones abarcan el período comprendido entre los años 1960 y 2022, mientras que los cambios mencionados se refieren al año 1750.

Cuadro 4.26: Expresiones simplificadas para calcular ERF a partir de la concentración de GHG. Donde C, N, M se refieren a las concentraciones de CO₂ en ppm, N₂O y CH₄ en ppb, respectivamente. La tabla es una adaptación de [33] y [39]. Los valores de las eficiencias radiativas de los gases halogenados se encuentran en las Tablas 4.13, 4.16, 4.18, 4.20, 4.22 y 4.24.

Gas	Expresión simplificada	Coefficientes
CO ₂	$C_{\alpha_{\max}} = C_0 - \frac{b_1}{2a_1}$	$a_1 = -2,475 \times 10^{-7} \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-2}$
	$\alpha' = d_1 - \frac{b_1^2}{4a_1}$, para $C > C_{\alpha_{\max}}$	$b_1 = 7,5906 \times 10^{-4} \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-1}$
	$\alpha' = d_1 + a_1(C - C_0)^2 + b_1(C - C_0)$, para $C_0 < C < C_{\alpha_{\max}}$	$c_1 = -2,1492 \times 10^{-3} \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-0,5}$
	$\alpha' = d_1$, para $C < C_0$	$d_1 = 5,2488 \text{ W m}^{-2}$
	$\alpha_{\text{N}_2\text{O}} = c_1 \sqrt{N}$	$C_0 = 277,15 \text{ ppm}$
	$\text{RF}_{\text{CO}_2} = (\alpha' + \alpha_{\text{N}_2\text{O}}) \ln \frac{C}{C_0}$	$e_1 = 1,05$
N ₂ O	$\text{RF}_{\text{N}_2\text{O}} = (a_2\sqrt{C} + b_2\sqrt{N} + c_2\sqrt{M} + d_2) (\sqrt{N} - \sqrt{N_0})$	$a_2 = -3,4197 \times 10^{-4} \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-1}$
	$\text{ERF}_{\text{N}_2\text{O}} = e_2 \cdot \text{RF}_{\text{N}_2\text{O}}$	$b_2 = 2,5455 \times 10^{-4} \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-1}$
		$c_2 = -2,4357 \times 10^{-4} \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-1}$
		$d_2 = 0,12173 \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-0,5}$
		$N_0 = 273,87 \text{ ppb}$
		$e_2 = 1,07$
CH ₄	$\text{RF}_{\text{CH}_4} = (a_3\sqrt{M} + b_3\sqrt{N} + d_3) (\sqrt{M} - \sqrt{M_0})$	$a_3 = -8,9603 \times 10^{-5} \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-1}$
	$\text{ERF}_{\text{CH}_4} = e_3 \cdot \text{RF}_{\text{CH}_4}$	$b_3 = -1,2462 \times 10^{-4} \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-1}$
		$d_3 = 0,045194 \text{ W m}^{-2} \text{ ppm}^{-0,5}$
		$M_0 = 731,41 \text{ ppb}$
		$e_3 = 0,86$
H _x	$\text{ERF}_{\text{H}_x} = e_x(X - X_0)$	X y X ₀ en ppb e_x , eficiencias radiativas ($\text{W m}^{-2} \text{ ppm}^{-1}$)

concentración representa el 16,18 % del ERF total. De acuerdo con los datos obtenidos en este estudio en el año 2013, el N₂O desplazó al CFC-12 como el tercer contribuyente más significativo al ERF. Este cambio también fue reportado por el IPCC en su Quinto Informe de Evaluación (AR5) [60]. Este dato sitúa al N₂O en una posición de relevancia, dado que, a diferencia de los CFCs, las emisiones de N₂O continúan experimentando un incremento.

Lo que sigue será la comparación de los datos obtenidos en este estudio con los resultados de un par investigaciones previas. El primer estudio, realizado por el NOAA [64], reporta cambios en el ERF para diversos grupos de GHG en un periodo que abarca desde 1979 hasta la actualidad. Para realizar la comparativa, la ventana de tiempo será en el periodo de 1979-2022. Como se muestra en la Figura 4.25, se presenta una comparativa de nuestros datos con los reportados por el NOAA.

La evolución del ERF es prácticamente la misma en ambos estudios, para el año 2022 NOAA reporta un ERF total de 3.45 W m^{-2} (sin contar PFCs), en la Tabla se muestran los aportes al ERF de cada grupo de GHG. Las principales diferencias se deben a los gases

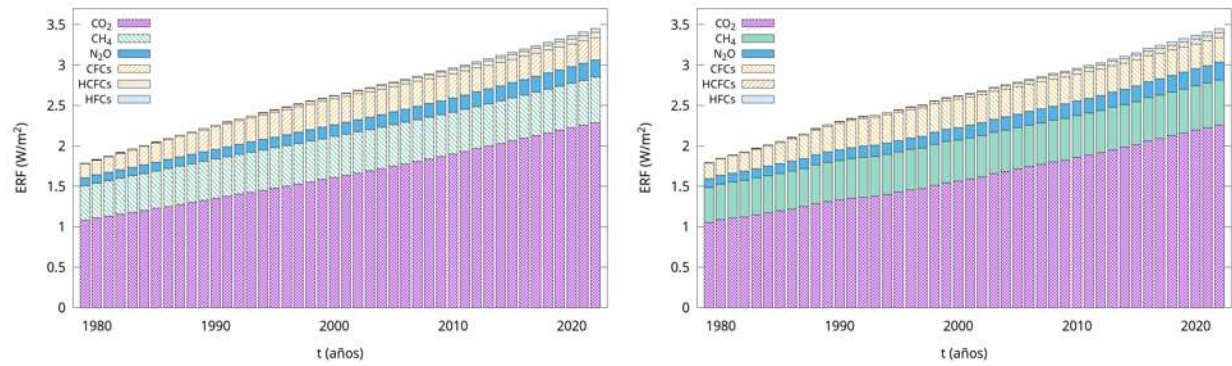


Figura 4.25: Forzamiento radiativo efectivo para diversos GHG. A la izquierda los datos generados en este trabajo de tesis. A la derecha los datos reportados por el NOAA.

Cuadro 4.27: Comparativa del ERF (W m^{-2}) para GHG, a la izquierda datos reportados por NOAA, a la derecha los datos obtenidos en este trabajo de tesis. *Engloba a los CFCs, halones y clorocarbonos.

Forzador	NOAA		Este estudio	
	ERF (W m^{-2})		ERF (W m^{-2})	
	1979	2022	1979	2022
CO ₂	1,054	2,256	1,082	2,288
CH ₄	0,432	0,560	0,426	0,561
N ₂ O	0,108	0,219	0,098	0,211
ODS*	0,194	0,303	0,179	0,340
HCFCs	0,008	0,061	0,007	0,064
HFCs	0,001	0,050	0,0007	0,048
Total	1,796	3,450	1,786	3,450

considerados, el reporte del NOAA incluye en el grupo de los CFCs a los halones y clorocarbonos, con un total de 8 gases, mientras que nuestro estudio en estos tres grupos hay un total de 17 gases. En la Tabla 4.27 se resumen las ERF de ambos estudios.

El segundo estudio de comparación es el Sexto Informe de Evaluación del IPCC (AR6), a diferencia de lo reportado por NOAA, el AR6 reporta ERF para gases individuales, lo que nos permite una mejor comparación de los resultados obtenidos de nuestra metodología, la Tabla 4.28 condensa los resultados. Donde salvo un par de marcadas diferencias (PFC-14 y HFC-32) los resultados son prácticamente los mismos en el resto de gases individuales y en las sumas tanto de grupos como en el total del ERF.

El segundo estudio de comparación es el Sexto Informe de Evaluación del IPCC (AR6) [65]. A diferencia de lo reportado por NOAA, el AR6 presenta ERF para gases individuales, lo que nos permite una mejor comparación de los resultados obtenidos. En la Tabla 4.28 se condensa la comparativa de resultados de ambos estudios. Con la excepción de un par de

Cuadro 4.28: Forzamientos radiaticos efectivos (W m^{-2}) para GHG cuyo ERF sea de al menos 0.001 W m^{-2} .

Forzador	AR6 ERF (W m^{-2})		Este estudio ERF (W m^{-2})		Forzador	AR6 ERF (W m^{-2})		Este estudio ERF (W m^{-2})	
	2011	2019	2011	2019		2011	2019	2011	2019
CO ₂	1,882	$2,156 \pm 0,259$	1,933	2,193	CFC-11	0,070	0,066	0,063	0,06
CH ₄	0,521	$0,544 \pm 0,109$	0,518	0,544	CFC-12	0,189	0,180	0,184	0,173
N ₂ O	0,184	$0,208 \pm 0,031$	0,179	0,203	CFC-113	0,022	0,021	0,022	0,020
SF ₆	0,004	0,006	0,004	0,006	CFC-114	0,005	0,005	0,005	0,005
PFC-14 (CF ₄)	0,004	0,005	0,008	0,009	CFC-115	0,002	0,002	0,002	0,002
PFC-116 (C ₂ F ₆)	0,001	0,001	0,001	0,001	HFC-134a	0,010	0,018	0,011	0,018
HCFC-141b	0,003	0,004	0,003	0,004	HFC-23	0,005	0,006	0,005	0,006
HCFC-142b	0,004	0,004	0,004	0,004	HFC-32	0,001	0,002	0,0005	0,002
HCFC-22	0,046	0,053	0,045	0,053	HFC-125	0,002	0,007	0,002	0,007
CCl ₄	0,014	0,013	0,014	0,013	HFC-143a	0,002	0,004	0,002	0,004
Suma de ODS	0,362	0,354	0,350	0,343	Suma de HFCs	0,022	0,040	0,021	0,039
Total halocarbonos	0,394	$0,408 \pm 0,078$	0,385	0,400	Suma de PFCs	0,006	0,007	0,014	0,018
Total GHG	2.981	$3,317 \pm 0,278$	3.015	3.340					

marcadas discrepancias (PFC-14 y HFC-32), los resultados obtenidos son prácticamente idénticos en el resto de gases individuales y en las sumas tanto de los grupos como en el total del ERF.

Los resultados obtenidos en este trabajo de tesis son congruentes con los de otros estudios previos, lo que consolida la metodología empleada para modelar emisiones y concentraciones de GHG mediante EDOs. Para el año 2024 el ERF antropogénico fue de $3,54 \text{ W m}^{-2}$ [66], lo que representa un incremento de $0,08 \text{ W m}^{-2}$ en un período de dos años. El principal contribuyente a este aumento es el CO₂. Sin embargo, es importante destacar que las enmiendas derivadas del Protocolo de Montreal han contribuido a la reducción del calentamiento global.

En la presente década se asienta la base para mantener el incremento de la temperatura global por debajo de los $1,5 \text{ }^{\circ}\text{C}$ respecto a la era preindustrial. Si no se lograra, las consecuencias para la vida en el planeta no tendrían precedentes. De acuerdo con lo establecido en la COP28, el incremento de la temperatura podría verse reducido a la mitad si se implementan los cambios propuestos [67].

Bibliografía

- [1] R. M. Hoesly et al. «Historical (1750–2014) anthropogenic emissions of reactive gases and aerosols from the Community Emissions Data System (CEDS)». En: *Geoscientific Model Development* 11.1 (2018), págs. 369-408. DOI: [10.5194/gmd-11-369-2018](https://doi.org/10.5194/gmd-11-369-2018).
- [2] G. Janssens-Maenhout et al. «EDGAR v4.3.2 Global Atlas of the three major greenhouse gas emissions for the period 1970–2012». En: *Earth System Science Data* 11.3 (2019), págs. 959-1002. DOI: [10.5194/essd-11-959-2019](https://doi.org/10.5194/essd-11-959-2019).
- [3] R. M. Andrew. «A comparison of estimates of global carbon dioxide emissions from fossil carbon sources». En: *Earth System Science Data* 12.2 (2020), págs. 1437-1465. DOI: [10.5194/essd-12-1437-2020](https://doi.org/10.5194/essd-12-1437-2020).
- [4] P. Friedlingstein et al. «Global Carbon Budget 2024». En: *Earth System Science Data* 17.3 (2025), págs. 965-1039. DOI: [10.5194/essd-17-965-2025](https://doi.org/10.5194/essd-17-965-2025).
- [5] EDGAR (Emissions Database for Global Atmospheric Research) Community GHG Database. *EDGAR Community GHG Database, a collaboration between the European Commission, Joint Research Centre (JRC), the International Energy Agency (IEA), and comprising IEA-EDGAR CO₂, EDGAR CH₄, EDGAR N₂O, EDGAR F-GASES version 2024*. Available at: https://edgar.jrc.ec.europa.eu/report_2024. European Commission, JRC, 2024. URL: https://edgar.jrc.ec.europa.eu/report_2024.
- [6] Rachel Hoesly et al. *CEDS v_2024_11_25 Gridded Emissions Data 0.5 degree*. Zenodo, nov. de 2024. DOI: [10.5281/zenodo.14145000](https://doi.org/10.5281/zenodo.14145000).
- [7] Global Carbon Project. *Supplemental data of Global Carbon Budget 2024 (Version 1.0)*. Ver. 1.0. [Data set]. Global Carbon Project, 2024. DOI: [10.18160/gcp-2024](https://doi.org/10.18160/gcp-2024).
- [8] J. Gütschow et al. «The PRIMAP-hist national historical emissions time series». En: *Earth System Science Data* 8.2 (2016), págs. 571-603. DOI: [10.5194/essd-8-571-2016](https://doi.org/10.5194/essd-8-571-2016).

-
- [9] Matthew W. Jones et al. *National contributions to climate change due to historical emissions of carbon dioxide, methane and nitrous oxide*. Ver. 2024.2. Zenodo, nov. de 2024. DOI: [10.5281/zenodo.14054503](https://doi.org/10.5281/zenodo.14054503).
- [10] T. Chai y R. R. Draxler. «Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)? - Arguments against avoiding RMSE in the literature». En: *Geoscientific Model Development* 7.3 (2014), págs. 1247-1250. DOI: [10.5194/gmd-7-1247-2014](https://doi.org/10.5194/gmd-7-1247-2014).
- [11] Andrej-Nikolai Spiess y Natalie Neumeyer. «An evaluation of R^2 as an inadequate measure for nonlinear models in pharmacological and biochemical research: a Monte Carlo approach». En: *BMC Pharmacology* 10.1 (jun. de 2010). Date: 2010/06/07, pág. 6. ISSN: 1471-2210. DOI: [10.1186/1471-2210-10-6](https://doi.org/10.1186/1471-2210-10-6).
- [12] Hannah Ritchie, Pablo Rosado y Max Roser. «Breakdown of carbon dioxide, methane, and nitrous oxide emissions by sector». En: *Our World in Data* (2020). URL: <https://archive.ourworldindata.org/20251204-144539/emissions-by-sector.html>.
- [13] Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). «Global Carbon and Other Biogeochemical Cycles and Feedbacks». En: *Climate Change 2021 - The Physical Science Basis: Working Group I Contribution to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press, 2023, págs. 673-816.
- [14] Victor Brovkin et al. «Role of land cover changes for atmospheric CO₂ increase and climate change during the last 150 years». En: *Global Change Biology* 10.8 (2004), págs. 1253-1266. DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1365-2486.2004.00812.x>.
- [15] M. Saunois et al. «The Global Methane Budget 2000–2017». En: *Earth System Science Data* 12.3 (2020), págs. 1561-1623. DOI: [10.5194/essd-12-1561-2020](https://doi.org/10.5194/essd-12-1561-2020).
- [16] H. Tian et al. «Global nitrous oxide budget (1980–2020)». En: *Earth System Science Data* 16.6 (2024), págs. 2543-2604. DOI: [10.5194/essd-16-2543-2024](https://doi.org/10.5194/essd-16-2543-2024).

-
- [17] Eberhard Hansis, Steven J. Davis y Julia Pongratz. «Relevance of methodological choices for accounting of land use change carbon fluxes». En: *Global Biogeochemical Cycles* 29.8 (2015), págs. 1230-1246. DOI: <https://doi.org/10.1002/2014GB004997>.
- [18] T. Gasser et al. «Historical CO₂ emissions from land use and land cover change and their uncertainty». En: *Biogeosciences* 17.15 (2020), págs. 4075-4101. DOI: [10.5194/bg-17-4075-2020](https://doi.org/10.5194/bg-17-4075-2020).
- [19] R. A. Houghton y A. Castanho. «Annual emissions of carbon from land use, land-use change, and forestry from 1850 to 2020». En: *Earth System Science Data* 15.5 (2023), págs. 2025-2054. DOI: [10.5194/essd-15-2025-2023](https://doi.org/10.5194/essd-15-2025-2023).
- [20] Susan Page et al. «The Amount of Carbon Released from Peat and Forest Fires in Indonesia During 1997». En: *Nature* 420 (dic. de 2002), págs. 61-5. DOI: [10.1038/nature01131](https://doi.org/10.1038/nature01131).
- [21] FAO. *Reducing enteric methane: Improving food security and livelihoods*. PDF report. Available at: <https://www.ccacoalition.org/resources/reducing-enteric-methane-improving-food-security-and-livelihoods>. 2020.
- [22] FAO. *World Food and Agriculture – Statistical Yearbook 2025*. Rome: Food y Agriculture Organization of the United Nations, 2025. DOI: [10.4060/cd4313en](https://doi.org/10.4060/cd4313en).
- [23] Marios Mermigkas et al. «FTIR Measurements of Greenhouse Gases over Thessaloniki, Greece in the Framework of COCCON and Comparison with S5P/TROPOMI Observations». En: *Remote Sensing* 13.17 (2021). ISSN: 2072-4292. DOI: [10.3390/rs13173395](https://doi.org/10.3390/rs13173395).
- [24] John P. O'Connor. «Modeling of Atmospheric Carbon Dioxide (CO₂) Concentrations as a Function of Fossil-Fuel and Land-Use Change CO₂ Emissions Coupled with Oceanic and Terrestrial Sequestration». En: *Climate* 8.5 (2020). ISSN: 2225-1154. DOI: [10.3390/cli8050061](https://doi.org/10.3390/cli8050061).

-
- [25] Kevin E. Trenberth y Lesley Smith. «The Mass of the Atmosphere: A Constraint on Global Analyses». En: *Journal of Climate* 18.6 (2005), págs. 864-875. DOI: [10.1175/JCLI-3299.1](https://doi.org/10.1175/JCLI-3299.1).
- [26] Donald P. Gatley, S. Herrmann y Hans-Joachim Kretzschmar. «A Twenty-First Century Molar Mass for Dry Air». En: *HVAC&R Research* 14.5 (2008), págs. 655-662. DOI: [10.1080/10789669.2008.10391032](https://doi.org/10.1080/10789669.2008.10391032).
- [27] Thomas Prohaska et al. En: *Pure and Applied Chemistry* 94.5 (2022), págs. 573-600. DOI: [doi:10.1515/pac-2019-0603](https://doi.org/10.1515/pac-2019-0603).
- [28] Dr. Xin Lan y Dr. Ralph Keeling. *NOAA/GML and Scripps Institution of Oceanography CO₂ and greenhouse gas trends*. <https://gml.noaa.gov/ccgg/trends/> and <https://scrippsco2.ucsd.edu/>. Accessed: 2024-10-20. 2024.
- [29] L. P. Steele, P. B. Krummel y R. L. Langenfelds. *Atmospheric methane record from Shetland Islands, Scotland (October 2002 version)*. Dataset in *Trends: A Compendium of Data on Global Change*. Original URL inactive: http://cdiac.esd.ornl.gov/trends/atm_meth/csiro/csiro-shetlandch4.html. 2002. (Visitado 13-09-2024).
- [30] CSIRO Oceans and Atmosphere y Australian Bureau of Meteorology. *Cape Grim Greenhouse Gas Monitoring Program*. <https://capegrim.csiro.au/>. Accessed: 2024-01-10. 2025.
- [31] D. M. Etheridge et al. *Historic CH₄ Records from Antarctic and Greenland Ice Cores, Antarctic Firn Data, and Archived Air Samples from Cape Grim, Tasmania*. Sep. de 2002. DOI: [10.3334/CDIAC/ATG.030](https://doi.org/10.3334/CDIAC/ATG.030).
- [32] X. Lan, K. W. Thoning y E. J. Dlugokencky. *Trends in Globally-Averaged CH₄, N₂O, and SF₆ Determined from NOAA Global Monitoring Laboratory Measurements*. 2025. DOI: [10.15138/P8XG-AA10](https://doi.org/10.15138/P8XG-AA10).
- [33] M. Meinshausen et al. «The shared socio-economic pathway (SSP) greenhouse gas concentrations and their extensions to 2500». En: *Geoscientific Model Development* 13.8 (2020), págs. 3571-3605. DOI: [10.5194/gmd-13-3571-2020](https://doi.org/10.5194/gmd-13-3571-2020).

-
- [34] G. S. Dutton y B. D. Hall. *Global Atmospheric Nitrous Oxide Hemispheric and Global Mean Dry Air Mole Fractions from the NOAA GML Halocarbons in situ Network, 1998–2023*. Ver. 2023-08-29. 2023. DOI: [10.7289/V5X0659V](https://doi.org/10.7289/V5X0659V).
- [35] S. A. Montzka, E. J. Dlugokencky y J. H. Butler. «Non-CO₂ greenhouse gases and climate change». En: *Nature* 476.7358 (sep. de 2011). Date: 2011/08/01, págs. 43-50. ISSN: 1476-4687. DOI: [10.1038/nature10322](https://doi.org/10.1038/nature10322).
- [36] Eric A. Heath. «Amendment to the Montreal Protocol on Substances that Deplete theOzone Layer (Kigali Amendment)». En: *International Legal Materials* 56.1 (2017), págs. 193-205. DOI: [10.1017/ilm.2016.2](https://doi.org/10.1017/ilm.2016.2).
- [37] G. Myhre et al. «Anthropogenic and natural radiative forcing». En: *Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Ed. por T. F. Stocker et al. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2013, págs. 659-740. DOI: [10.1017/CB09781107415324.018](https://doi.org/10.1017/CB09781107415324.018).
- [38] Chris Smith et al. *ClimateIndicator/data: Indicators of Global Climate Change 2023 revision 2*. Ver. v2024.05.29b. Zenodo, mayo de 2024. DOI: [10.5281/zenodo.11388387](https://doi.org/10.5281/zenodo.11388387).
- [39] C. Smith et al. «The Earth’s Energy Budget, Climate Feedbacks, and Climate Sensitivity: Supplementary Material». En: *Climate Change 2021: The Physical Science Basis*. Ed. por V. Masson-Delmotte et al. Supplementary Material. Cambridge, United Kingdom y New York, NY, USA: Intergovernmental Panel on Climate Change, 2021. URL: <https://www.ipcc.ch/>.
- [40] A. Engel et al. «Update on Ozone-Depleting Substances (ODSs) and Other Gases of Interest to the Montreal Protocol». En: *Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2018*. Ed. por World Meteorological Organization. Global Ozone Research and Monitoring Project - Report No. 58. Geneva, Switzerland: World Meteorological Organization, 2018, págs. 1.1-1.87.

-
- [41] Wenfeng Han et al. «Treatment of the potent greenhouse gas, CHF_3 —An overview». En: *Journal of Fluorine Chemistry* 140 (2012), págs. 7-16. ISSN: 0022-1139. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2012.04.012>.
- [42] Louise Du Toit. «Strengthening the Global Regulation of Hydrofluorocarbons under the Montreal Protocol». En: dic. de 2023, págs. 90-124. ISBN: 9789004684072. DOI: [10.1163/9789004684089_006](https://doi.org/10.1163/9789004684089_006).
- [43] David M. Lemal. «Perspective on Fluorocarbon Chemistry». En: *The Journal of Organic Chemistry* 69.1 (2004), págs. 1-11. DOI: [10.1021/jo0302556](https://doi.org/10.1021/jo0302556).
- [44] D. Say et al. «Global trends and European emissions of tetrafluoromethane (CF_4), hexafluoroethane (C_2F_6) and octafluoropropane (C_3F_8)». En: *Atmospheric Chemistry and Physics* 21.3 (2021), págs. 2149-2164. DOI: [10.5194/acp-21-2149-2021](https://doi.org/10.5194/acp-21-2149-2021).
- [45] Daniel A. Deeds et al. «Evidence for crustal degassing of CF_4 and SF_6 in Mojave Desert groundwaters». En: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 72.4 (2008), págs. 999-1013. ISSN: 0016-7037. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.gca.2007.11.027>.
- [46] David R. Worton et al. «Atmospheric Trends and Radiative Forcings of CF_4 and C_2F_6 Inferred from Firm Air». En: *Environmental Science & Technology* 41.7 (2007), págs. 2184-2189. DOI: [10.1021/es061710t](https://doi.org/10.1021/es061710t).
- [47] J. Mühle et al. «Perfluorocyclobutane (PFC-318, $\text{c-C}_4\text{F}_8$) in the global atmosphere». En: *Atmospheric Chemistry and Physics* 19.15 (2019), págs. 10335-10359. DOI: [10.5194/acp-19-10335-2019](https://doi.org/10.5194/acp-19-10335-2019).
- [48] E. S. Droste et al. «Trends and emissions of six perfluorocarbons in the Northern Hemisphere and Southern Hemisphere». En: *Atmospheric Chemistry and Physics* 20.8 (2020), págs. 4787-4807. DOI: [10.5194/acp-20-4787-2020](https://doi.org/10.5194/acp-20-4787-2020).
- [49] J. C. Laube et al. «Update on Ozone-Depleting Substances (ODSs) and Other Gases of Interest to the Montreal Protocol». En: *Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2022*. Ed. por World Meteorological Organization. GAW Report No. 278. 509 pp. Geneva: World Meteorological Organization, 2022. Cap. 1.

-
- [50] A. Gressent et al. «Growing Atmospheric Emissions of Sulfuryl Fluoride». En: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 126.9 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1029/2020JD034327>.
- [51] Richard O. Recknagel et al. «Mechanisms of carbon tetrachloride toxicity». En: *Pharmacology & Therapeutics* 43.1 (1989), págs. 139-154. ISSN: 0163-7258. DOI: [https://doi.org/10.1016/0163-7258\(89\)90050-8](https://doi.org/10.1016/0163-7258(89)90050-8).
- [52] Lei Hu et al. «Continued emissions of carbon tetrachloride from the United States nearly two decades after its phaseout for dispersive uses». En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 113.11 (2016), págs. 2880-2885. DOI: [10.1073/pnas.1522284113](https://doi.org/10.1073/pnas.1522284113).
- [53] Shanlan Li et al. «Emission estimates of methyl chloride from industrial sources in China based on high frequency atmospheric observations». En: *Journal of Atmospheric Chemistry* 74.2 (jun. de 2017), págs. 227-243. ISSN: 1573-0662. DOI: [10.1007/s10874-016-9354-4](https://doi.org/10.1007/s10874-016-9354-4).
- [54] Stephen Montzka et al. «Ozone-Depleting Substances (ODSs) and Related Chemicals». En: *Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2010*. Ed. por World Meteorological Organization. Global Ozone Research and Monitoring Project-Report No. 52. Geneva, Switzerland: World Meteorological Organization, 2011. Cap. 1. URL: https://tsapps.nist.gov/publication/get_pdf.cfm?pub_id=909747.
- [55] R. G. Prinn et al. «History of chemically and radiatively important atmospheric gases from the Advanced Global Atmospheric Gases Experiment (AGAGE)». En: *Earth System Science Data* 10.2 (2018), págs. 985-1018. DOI: [10.5194/essd-10-985-2018](https://doi.org/10.5194/essd-10-985-2018).
- [56] A. McCulloch. «Chloroform in the environment: occurrence, sources, sinks and effects». En: *Chemosphere* 50.10 (2003), págs. 1291-1308. ISSN: 0045-6535. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(02\)00697-5](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(02)00697-5).

-
- [57] D. R. Worton et al. «20th century trends and budget implications of chloroform and related tri-and dihalomethanes inferred from firm air». En: *Atmospheric Chemistry and Physics* 6.10 (2006), págs. 2847-2863. DOI: [10.5194/acp-6-2847-2006](https://doi.org/10.5194/acp-6-2847-2006).
- [58] F. Sherwood Rowland. «Stratospheric ozone depletion». En: *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences* 361.1469 (feb. de 2006), págs. 769-790. ISSN: 0962-8436. DOI: [10.1098/rstb.2005.1783](https://doi.org/10.1098/rstb.2005.1783).
- [59] M. Nicewonger, Eric Saltzman y S. Montzka. «ENSO-Driven Fires Cause Large Interannual Variability in the Naturally Emitted, Ozone-Depleting Trace Gas CH₃Br». En: *Geophysical Research Letters* 49 (feb. de 2022). DOI: [10.1029/2021GL094756](https://doi.org/10.1029/2021GL094756).
- [60] G. Myhre et al. «Anthropogenic and Natural Radiative Forcing». En: *Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Ed. por T. F. Stocker et al. Cambridge, United Kingdom y New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2013, págs. 659-740. DOI: [10.1017/CB09781107415324.018](https://doi.org/10.1017/CB09781107415324.018).
- [61] Souhail Souai et al. «Numerical study of thermal radiation heat transfer using lattice Boltzmann method». En: *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 82.5 (2022), págs. 164-184. DOI: [10.1080/10407790.2022.2083849](https://doi.org/10.1080/10407790.2022.2083849).
- [62] Øivind Hodnebrog et al. «The effect of rapid adjustments to halocarbons and N₂O on radiative forcing». En: *Climate and Atmospheric Science* 3.1 (nov. de 2020), págs. 43. ISSN: 2397-3722. DOI: [10.1038/s41612-020-00150-x](https://doi.org/10.1038/s41612-020-00150-x).
- [63] Øivind Hodnebrog et al. «Updated Global Warming Potentials and Radiative Efficiencies of Halocarbons and Other Weak Atmospheric Absorbers». En: *Reviews of Geophysics* 58 (sep. de 2020). DOI: [10.1029/2019RG000691](https://doi.org/10.1029/2019RG000691).
- [64] NOAA Global Monitoring Laboratory. *Annual Greenhouse Gas Index (AGGI)*. NOAA website. Accessed: 2025-01-16. 2025. URL: <https://gml.noaa.gov/aggi/aggi.html>.

-
- [65] P. Forster et al. «The Earth's Energy Budget, Climate Feedbacks, and Climate Sensitivity». En: *Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Ed. por V. Masson-Delmotte et al. Cambridge, United Kingdom y New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2021, págs. 923-1054. DOI: [10.1017/9781009157896.009](https://doi.org/10.1017/9781009157896.009).
- [66] P. M. Forster et al. «Indicators of Global Climate Change 2024: annual update of key indicators of the state of the climate system and human influence». En: *Earth System Science Data* 17.6 (2025), págs. 2641-2680. DOI: [10.5194/essd-17-2641-2025](https://doi.org/10.5194/essd-17-2641-2025).
- [67] Christine M. McKenna et al. «Stringent mitigation substantially reduces risk of unprecedented near-term warming rates». En: *Nature Climate Change* 11.2 (feb. de 2021), págs. 126-131. ISSN: 1758-6798. DOI: [10.1038/s41558-020-00957-9](https://doi.org/10.1038/s41558-020-00957-9).

Capítulo 5

Conclusiones

En el presente proyecto de tesis, se ha empleado un modelo matemático basado en EDOs para el análisis de las emisiones y concentraciones de los principales gases de efecto invernadero: CO_2 , CH_4 y N_2O . Asimismo, se llevó a cabo el modelado de las concentraciones de diversos gases halogenados, cuya contribución al calentamiento global debe ser tomada en cuenta. Para llevar a cabo el modelado de estos gases, se ha implementado un algoritmo genético, el cual ha sido programado con el propósito de obtener los valores de los parámetros que mejor se ajustan a los datos observacionales reportados.

El uso de esta metodología, basada en el uso de un algoritmo genético para la resolución de EDOs y la determinación del mejor ajuste a los datos reportados, ha demostrado su eficacia al replicar de forma satisfactoria la dinámica de emisiones y concentraciones. Con los modelos empleados, se logró replicar con fiabilidad los resultados de estimación del calentamiento global en función del forzamiento radiativo efectivo. Este concepto permite cuantificar el cambio en el calor retenido por la Tierra. De acuerdo con los resultados obtenidos, para el año 2022 este valor se situó en 3.486 W m^{-2} , lo que supone un incremento respecto al año 1750, cuando se situaba en cero.

Al aplicar la metodología propuesta, es posible estimar los cambios en la concentración de los gases más relevantes. Se prevé que el CO_2 alcance las 800 ppm para el año 2100, lo que representa casi el doble de las 427 ppm medidas a principios de 2026. Un comportamiento similar se observa en el CH_4 , que alcanzaría las 3500 ppb para el mismo período, lo que

es casi el doble de las 1941 ppb medidas a principios de 2026. Se prevé un incremento moderado en el N_2O , con un aumento del 10 % en su concentración, pasando de 334 ppb a 373 ppb. En relación con los gases halogenados, la proyección de sus concentraciones se ve dificultada por la dependencia del cumplimiento de las enmiendas derivadas del Protocolo de Montreal. No obstante, se prevé una reducción de la concentración general en todas las especies halogenadas.

En el contexto mencionado, el presente trabajo de tesis ofrece una herramienta práctica y replicable en una amplia gama de ordenadores disponibles en el mercado. No obstante, es preciso señalar que esta simplicidad también representa su principal limitación, puesto que el modelo excluye fenómenos de fondo que influyen en el ciclo de emisiones. No obstante, a pesar de las limitaciones mencionadas, el modelo propuesto demuestra una capacidad de reproducción de la dinámica de gran parte de los gases de efecto invernadero que resulta satisfactoria, lo que lo convierte en una opción viable para su implementación. Este enfoque puede servir como punto de partida para el desarrollo de modelos más complejos, capaces de incorporar ciclos económicos, interacciones químicas en la atmósfera y otros procesos relevantes. De acuerdo con lo anteriormente mencionado, es factible que en el futuro este modelo sea utilizado como una herramienta que permita la exploración de posibles trayectorias en la evolución de los gases de efecto invernadero durante las próximas décadas.

Luis Felipe Mendoza Mendoza

Modelo dinámico de las variables climáticas globales de la Tierra..pdf

 Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Detalles del documento

Identificador de la entrega

trn:oid::3117:558177644

Fecha de entrega

18 feb 2026, 8:22 a.m. GMT-6

Fecha de descarga

18 feb 2026, 8:27 a.m. GMT-6

Nombre del archivo

Modelo dinámico de las variables climáticas globales de la Tierra..pdf

Tamaño del archivo

14.6 MB

158 páginas

43.750 palabras

210.973 caracteres

17% Similitud general

El total combinado de todas las coincidencias, incluidas las fuentes superpuestas, para ca...

Fuentes principales

- 16%  Fuentes de Internet
- 10%  Publicaciones
- 0%  Trabajos entregados (trabajos del estudiante)

Marcas de integridad

N.º de alerta de integridad para revisión



Caracteres reemplazados

154 caracteres sospechosos en N.º de páginas

Las letras son intercambiadas por caracteres similares de otro alfabeto.

Los algoritmos de nuestro sistema analizan un documento en profundidad para buscar inconsistencias que permitirían distinguirlo de una entrega normal. Si advertimos algo extraño, lo marcamos como una alerta para que pueda revisarlo.

Una marca de alerta no es necesariamente un indicador de problemas. Sin embargo, recomendamos que preste atención y la revise.

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



A quien corresponda,

Por este medio, quien abajo firma, bajo protesta de decir verdad, declara lo siguiente:

- Que presenta para revisión de originalidad el manuscrito cuyos detalles se especifican abajo.
- Que todas las fuentes consultadas para la elaboración del manuscrito están debidamente identificadas dentro del cuerpo del texto, e incluidas en la lista de referencias.
- Que, en caso de haber usado un sistema de inteligencia artificial, en cualquier etapa del desarrollo de su trabajo, lo ha especificado en la tabla que se encuentra en este documento.
- Que conoce la normativa de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, en particular los Incisos IX y XII del artículo 85, y los artículos 88 y 101 del Estatuto Universitario de la UMSNH, además del transitorio tercero del Reglamento General para los Estudios de Posgrado de la UMSNH.

Datos del manuscrito que se presenta a revisión		
Programa educativo	Doctorado en ciencias en ingeniería física.	
Título del trabajo	Modelo dinámico de las variables climáticas globales de la Tierra.	
	Nombre	Correo electrónico
Autor/es	Luis Felipe Mendoza Mendoza	luis.mendoza@umich.mx
Director	Francisco Shidartha Guzmán Murillo	francisco.s.guzman@umich.mx
Codirector		
Coordinador del programa	Gonzalo Viramontes Gamboa	gvgamboa@umich.mx

Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Asistencia en la redacción	No	
Traducción al español	No	
Traducción a otra lengua	No	
Revisión y corrección de estilo	Si	Corrección de estilo y errores tipográficos.

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Análisis de datos	No	
Búsqueda y organización de información	No	
Formateo de las referencias bibliográficas	Si	Conversión de citas a formato BibTex.
Generación de contenido multimedia	No	
Otro	No	

Datos del solicitante	
Nombre y firma	Luis Felipe Mendoza Mendoza 
Lugar y fecha	Morelia Michoacán a 4 de febrero de 2026