



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

**INVERSIÓN SIMULTÁNEA DE AEROSOL
ATMOSFÉRICO Y VAPOR DE AGUA EN COLUMNA
CON EL ALGORITMO DE GRASP**

Autora: Claudia Torres Marcos

Tutores: Marcos Herreras Giralda, Roberto Román Díez

2023

DEDICATORIA

A mi familia, por vuestro apoyo incondicional, por haberme sacado adelante y haberme ayudado a cumplir mis sueños.

A Elvira, por haber aguantado a mi lado toda la carrera y hacer la rutina un poco más bonita, aunque no siempre haya sido fácil.

A mis amigos, por que sin vosotros no lo habría conseguido. Porque la carrera han sido las clases; pero también el mus, la cafetería, el drive, las fiestas, los lloros y la familia que poco a poco hemos creado.

A mis tutores, al personal docente de la UVa y a GRASP, por que sin ellos esto no sería posible.

Gracias Marcos, por apostar por mí, por todas las horas que le has hechado y por el cariño y pasión con el que lo has ido haciendo.

A la Claudia del pasado por luchar para convertirse en *la científica* que siempre desearé ser, por no tirar la toalla y hacernos llegar hasta aquí.

ÍNDICE GENERAL

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Transferencia radiativa	2
1.1.1. Ecuación de la transferencia radiativa.	3
1.1.2. Ley de Beer-Bouger-Lambert.	3
1.1.3. Espesor óptico total: TOD	4
1.2. Aerosoles atmosféricos	5
1.2.1. Distribución de tamaños	5
1.2.2. Absorción y forzamiento radiativo.	5
1.2.3. Scattering (dispersión).	6
1.2.4. Albedo de dispersión simple	7
1.3. Vapor de agua.	7
1.4. Tipos de aerosol	8
1.4.1. Aerosol producido por la quema de biomasa	8
1.4.2. Aerosol urbano industrial	8
1.4.3. Aerosol desértico	9
1.4.4. Aerosol oceánico o marítimo	10
1.5. Objetivos	11
2. INSTRUMENTACIÓN.	12
2.1. Descripción general.	12
2.2. Medidas	13
2.2.1. Medidas de irradiancia directa solar	13
2.2.2. Medidas de la radiancia del cielo	14
2.3. Salida de datos	14
2.4. Calibración y errores	14
3. METODOLOGÍA.	16
3.1. GRASP.	16
3.1.1. Módulo de transferencia radiativa (<i>forward model</i>).	16
3.1.2. Módulo de inversión numérica (<i>inversion model</i>).	17
3.2. Estrategia.	19
3.2.1. Puesta en uso del Módulo forward: transferencia radiativa.	20

3.2.2. Introducción de ruido	20
3.2.3. Módulo de inversión numérica	21
4. RESULTADOS	24
4.1. Simulación (forward model)	24
4.2. Inversión sin ruido	25
4.3. Introducción de ruido.	26
4.4. Inversión con ruido	27
4.4.1. Diferencias relativas entre la radiancia del cielo obtenida y la original..	29
4.4.2. Distribución de tamaños de los aerosoles	29
4.4.3. Albedo de dispersión simple	31
4.5. Vapor de agua simulado y el recuperado	33
5. CONCLUSIONES.	35

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1	Contribuciones al forzamiento radiativo de las emisiones de diferentes componentes atmosféricas entre el 1750 y 2019. Imagen extraída de [Szopa and Zanis, 2021]	2
1.2	Esquema de la distribución de tamaños típica de los aerosoles en el que se pueden apreciar los dos modos así como los mecanismos de formación y eliminación en la atmósfera [Toledano Olmeda et al., 2005].	6
1.3	Distribución de la radiación dispersada en el scattering de Rayleigh, de Mie y en óptica geométrica. Fuente: https://biblat.unam.mx/hevila/RevistaCintex/2015/vol120/no1/3.pdf	6
1.4	Espectro de absorción de distintos gases de efecto invernadero, entre los que podemos ver el espectro de absorción del vapor de agua. https://meteor.geol.iastate.edu/gccourse/forcing/forcing_lecture_es.html	7
1.5	Representación del albedo de dispersión simple y de la distribución de tamaños para cada uno de los escenarios [Dubovik et al., 2002].	10
2.1	CIMEL CE318, de la Universidad de Valladolid realizando medidas de la radiancia del cielo.	12
2.2	Esquema de los planos almucantar, principal e híbrido realizados por los fotómetros CIMEL. En la parte superior se muestran los ángulos medidos en cada caso. [González Catón et al., 2021]	13
2.3	Definición de los ángulos acimutal y cenital de GRASP.	13
3.1	Proceso de la realización del trabajo, en la parte superior se muestra el módulo de forward, a la derecha se puede apreciar la introducción de ruido, en la parte inferior cada una de las iteraciones del módulo de inversión y en la parte izquierda la comparación de los escenarios originales y los recuperados. Figura extraída de [Román et al., 2018].	19
4.1	TOD y la radiancia del cielo normalizada para dos longitudes de onda; 440 nm y 1020 nm simulados para cada uno de los seis escenarios a partir de los datos extraídos de [Dubovik et al., 2002]. Cada uno de los colores representa un escenario, como se puede ver en las respectivas leyendas.	25
4.2	Variación de radiancia entre las medidas simuladas y los parámetros recuperados en un caso ideal, sin ruido. Se define $\Delta rad = (I_{obtenida} - I_{simulada}) / (I_{simulada}) \cdot 100$. Cada una de las subfiguras muestran Δrad para una de las longitudes de onda perteneciente a los canales asociados a los aerosoles. Los escenarios se representan en colores diferentes.	26

4.3	Concentración de volumen por unidad de columna en función del radio de las partículas. Cada gráfica representa un escenario. La línea roja continua representa los datos sintéticos de referencia mientras que la línea discontinua azul representa los datos recuperados.	27
4.4	Superposición de ruido para el TOD y la radiancia del cielo a 440 nm y 1020 nm respectivamente en Greenbelt, Maryland. Cada uno de los ruidos está representado en un color.	28
4.5	variación de radiancia entre las medidas simuladas y el valor medio de los 50 parámetros obtenidos tras la introducción de un ruido. Se define $\Delta rad = (I_{obtenida} - I_{simulada}) / (I_{simulada}) \cdot 100$. Cada una de las subfiguras muestran Δrad para una de las longitudes de onda perteneciente a los canales asociados a los aerosoles. Los escenarios se representan en colores diferentes.	30
4.6	Distribución de tamaños para los seis escenarios estudiados. En rojo se muestran las distribuciones de tamaños iniciales, en azul la media de las distribuciones de tamaños recuperadas, la zona sombreada gris representa los datos recuperados pertenecientes al rango intercuartílico (RIC) es decir a los datos entre el primer y tercer cuartil y finalmente las barras verticales azules comprenden los puntos entre el primer y el noveno decil.	31
4.7	Albedo de dispersión simple (SSA) para los seis escenarios estudiados. En rojo se muestran los albedos de dispersión simple iniciales, en azul la media de los albedos de dispersión simple recuperados, la zona sombreada gris representa los datos recuperados pertenecientes al rango intercuartílico (RIC) es decir a los datos entre el primer y tercer cuadrante y finalmente las barras verticales azules comprenden los puntos entre el primer y el noveno decil.	32
4.8	Panel superior: correlación entre el vapor de agua recuperado en cada escenario y el vapor de agua simulado empleando el Módulo Forward de GRASP. Cada uno de los grupos puntos azules representan el vapor de agua en columna para cada uno de los escenarios; en el eje Y se representa el vapor de agua para las 50 atmósferas obtenidas para cada escenario y en el eje X se representa el vapor de agua que se ha proporcionado a la hora de realizar la simulación. Los escenarios tienen diferentes concentraciones de vapor de agua en columna y el orden de menor a mayor concentración es: Golfo Pérsico, Arabia Saudí, Paris, Greenbelt, Cerrado y el Bosque Amazónico. Panel inferior: histograma que representa la distribución de probabilidad de las concentraciones de vapor de agua obtenidas menos las simuladas.	34

RESUMEN

El vapor de agua y los aerosoles atmosféricos son dos componentes de la atmósfera que influyen en el forzamiento radiativo del sistema Tierra-atmósfera, influyendo al cambio climático de la Tierra. Este trabajo expone una estrategia para obtener propiedades de ambos agentes de forma simultánea.

Empleando el módulo de simulación del algoritmo de GRASP (Generalized Retrieval of Atmospheric and Surface Properties), se han simulado las medidas realizadas por un CIMEL CE318 para seis escenarios atmosféricos diferentes. Cada escenario tiene una atmósfera caracterizada por un tipo de aerosol del tipo de quema de biomasa, urbano-industrial o desértico y una diferente cantidad de vapor de agua precipitable. Posteriormente, para dotar a los escenarios de un mayor realismo, se ha realizado una adición de ruido sintético a las medidas simuladas.

Una vez se obtienen los escenarios sintéticos con su ruido asociado, se emplea el módulo de inversión numérica de GRASP para obtener los parámetros atmosféricos asociados a cada caso.

Para comprobar la fiabilidad del método, se comparan la radiancia, la distribución de tamaños, el albedo de scattering simple y la concentración del vapor de agua en columna de las inversiones con su respectiva atmósfera simulada.

ABSTRACT

Water vapour and atmospheric aerosols are two components of the atmosphere that influence the radiative forcing of the Earth-atmosphere system, influencing the Earth's climate change. This work outlines a strategy to obtain properties of both agents simultaneously.

Using the simulation module of the GRASP (Generalized Retrieval of Atmospheric and Surface Properties) algorithm, the measurements made by a CIMEL CE318 have been simulated for six different atmospheric scenarios. Each scenario has an atmosphere characterised by an aerosol type: biomass burning, urban-industrial or desert type and a different amount of precipitable water vapour. Subsequently, to make the scenarios more realistic, synthetic noise has been added to the simulated measurements.

Once the synthetic scenarios with their associated noise are obtained, the GRASP numerical inversion module is used to obtain the atmospheric parameters associated with each case.

To check the reliability of the method, the radiance, size distribution, simple scattering albedo and column water vapour concentration of the inversions are compared with their respective simulated atmosphere.

1. INTRODUCCIÓN

Los aerosoles atmosféricos son un conjunto de partículas sólidas, líquidas o una mezcla suspendidas en la atmósfera [Baron and Willeke, 2001]. Estos presentan una gran variabilidad temporal y geográfica en sus propiedades debida a la gran variedad de aerosoles producidos en distintos lugares, como se explica con más detalle en el Apartado 1.4 .

Una clasificación de los aerosoles es según su **formación** [Toledano Olmeda et al., 2005]: los *aerosoles primarios* son aquellas partículas emitidas directamente a la atmósfera mientras que los *aerosoles secundarios* son aquellos formados en la atmósfera bien por gases precursores o bien por nucleación de nuevas partículas. También se pueden clasificar según su **origen**: como *naturales* como los aerosoles desérticos o marinos entre los que se pueden encontrar el polvo mineral o el polen, y *antropogénicos* como los aerosoles producidos por la quema de biomasa o los urbano-industriales; un ejemplo es el *black carbon* producido tras la quema de combustibles fósiles.

La presencia de aerosoles en la atmósfera puede afectar al clima produciendo un efecto de calentamiento o enfriamiento neto del sistema Tierra-atmósfera, siendo este uno de los principales intereses que llevan al estudio de los aerosoles. Estos efectos de calentamiento o enfriamiento atmosférico, ya sea una contribución a nivel local o a nivel global, son causados principalmente por el scattering y la absorción, como se explicará a continuación.

Si la cantidad de radiación solar que es devuelta al espacio por los fenómenos de scattering con las componentes atmosféricas incrementa, entonces la cantidad de radiación solar que llega a la superficie terrestre disminuirá. Se produce entonces un efecto de enfriamiento. Un ejemplo de aerosoles que producen un efecto de enfriamiento localizado son los sulfatos emitidos por las erupciones volcánicas, que pueden formar nubes de partículas que reflejan la luz solar.

Por lo contrario, si los aerosoles tienen una gran capacidad para absorber la radiación solar, esta radiación será posteriormente emitida en forma de radiación de onda larga, produciendo un efecto de calentamiento. Este es el caso del *black carbon* emitido por la quema de biomasa (hollín) y de los gases de escape de los vehículos.

Los aerosoles también juegan un papel importante en el proceso de formación de las nubes. Actúan como núcleos de condensación y de hielo en las nubes e influyen en propiedades como el tamaño de las gotas y la duración de las nubes.

El impacto neto de los aerosoles es por lo tanto una combinación de los efectos de enfriamiento y calentamiento atmosférico [Toledano Olmeda et al., 2005]. No obstante, su influencia sobre el cambio climático es muy compleja y varía dependiendo de las condiciones locales y regionales.

Los aerosoles tienen una vida útil relativamente corta en la atmósfera en comparación con los gases invernadero, como el dióxido de carbono. Esto implicaría que su efecto climático es más inmediato y localizado.

A pesar de los esfuerzos dedicados al estudio del impacto climático de los aerosoles, el Panel Intergubernamental sobre el Cambio Climático (IPCC) señala que los aerosoles siguen siendo una de las partes más desconocidas y con los efectos más inciertos del sistema climático [Szopa and Zanis, 2021].

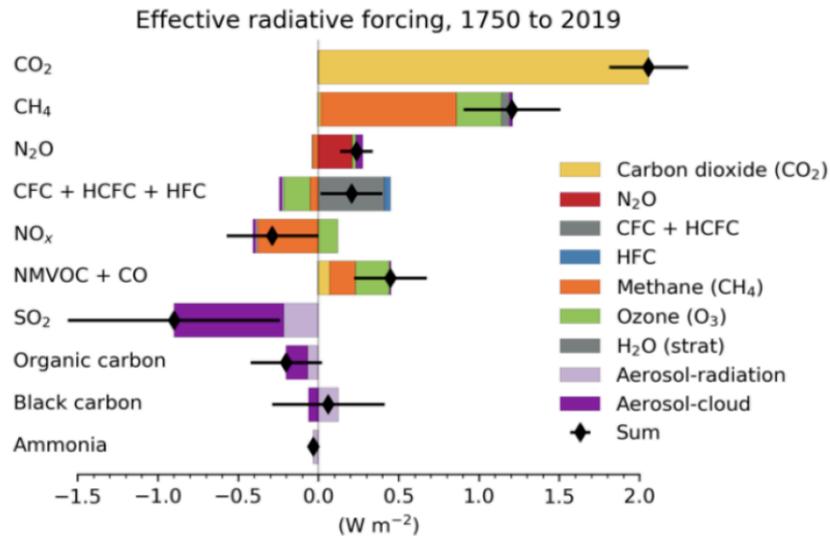


Figura 1.1: Contribuciones al forzamiento radiativo de las emisiones de diferentes componentes atmosféricas entre el 1750 y 2019. Imagen extraída de [Szopa and Zanis, 2021]

La Figura 1.1 muestra las contribuciones al forzamiento radiativo de algunas de las principales emisiones de constituyentes atmosféricos. A pesar de que los gases efecto invernadero muestran el mayor impacto en el efecto del forzamiento radiativo en la Tierra, los aerosoles, aun teniendo un efecto significativamente menor, presentan una de las mayores incertidumbres asociadas.

Los aerosoles atmosféricos y sus propiedades se pueden medir empleando distintas estrategias. Las más comunes son; la toma de muestras para posteriormente analizarlas en el laboratorio, se conoce como medidas *in situ* [Espinosa et al., 2017] y se pueden realizar tanto a nivel del suelo como a diferentes alturas, y la inferencia de las propiedades de los aerosoles a partir del efecto que provocan en la radiación solar a lo largo de la columna atmosférica, que se realiza empleando distintas técnicas de teledetección [Román et al., 2018]. A lo largo de este trabajo se emplea la teledetección, empleando un fotómetro CIMEL CE318 (<https://www.cimel.fr/>).

A pesar de la gran variedad de características de los aerosoles, centraremos el estudio en la distribución de tamaños (Size Distribution, *SD*), la absorción, la dispersión y el albedo de dispersión simple (Single Scattering Albedo, *SSA*) así como en la formación de los aerosoles.

Este trabajo consiste en la obtención de la atmósfera responsable de la disipación de la radiación empleando el algoritmo GRASP (Generalized Retrieval of Atmospheric and Surface Properties) y conocidas la irradiancia solar extraterrestre y la irradiancia en un punto de la superficie terrestre (*F*). En este trabajo se emplean como *INPUT* los valores análogos asociados a la irradiancia solar (*I*) [Liou, 2002].

1.1. Transferencia radiativa

El sol es la fuente principal de la radiación electromagnética que llega al sistema Tierra-atmósfera. Dicha radiación se emite en un rango espectral que va desde el ultravioleta hasta el infrarrojo cercano, concentrando la mayor parte de su energía entre las longitudes de onda de 250

a 4000 nm. [Liou, 2002]

Se define irradiancia (F) como la cantidad de radiación medida por unidad de tiempo sobre un área perpendicular a la dirección de propagación. Una vez la irradiancia extraterrestre cruza la atmósfera hay parte que avanza en línea recta, también conocida como irradiancia directa, otra parte que se desvía por scattering, conocida como radiación difusa, esta puede llegar a la Tierra en una dirección distinta a la original o volver al espacio y una última parte que es absorbida. Se define la radiancia (I) como la radiación solar difusa (energía) por unidad de tiempo, de área y de ángulo sólido (estereorradián) en una dirección determinada quedando así completamente determinado el campo radiativo dentro de un medio.

Puesto que no es posible determinar una única atmósfera que produzca estas condiciones de disipación debido a que es un problema degenerado. Es necesario hallar cual de las infinitas atmósferas que producen las mismas medidas en cada caso es la adecuada a un escenario dado.

El sistema Tierra-atmósfera puede calentarse gracias a la energía solar absorbida por la atmósfera y la superficie de la Tierra, que permiten que estas se calienten y emitan radiación. Se obtiene así una temperatura media de la superficie terrestre de unos 288 K y en la atmósfera de 255 K [Liou, 2002]. La radiación térmica emitida se encuentra en la región de onda larga (*longwave*), en el rango de entre 4 y 100 μm . Es el equilibrio térmico entre la radiación solar y de onda larga lo que determina la temperatura de la atmósfera y la superficie terrestre.

1.1.1. Ecuación de la transferencia radiativa

Un haz de radiación que atraviesa un medio se debilitará por su interacción con la materia. Suponiendo un haz de radiación monocromática (λ) de intensidad inicial I_λ , al atravesar un medio de espesor ds en la dirección de propagación, la intensidad se convertirá en $I_\lambda + dI_\lambda$. Se define así la ecuación de transferencia radiativa [Liou, 2002]:

$$dI_\lambda = -k_\lambda \rho I_\lambda ds + j_\lambda \rho ds = (-I_\lambda + J_\lambda) k_\lambda \rho ds, \quad (1.1)$$

donde ρ es la densidad del medio; k_λ es la sección eficaz de extinción másica (unidades de área entre masa) a la longitud de onda dada; y j_λ es el coeficiente de emisión del medio a la longitud de onda.

El primer término de la ecuación está asociado a la absorción y scattering de la radiación incidente, que al verse reducida, vendrá acompañado de un menos. El segundo término expresa el incremento de radiación debido a la emisión del medio y al scattering múltiple de otras direcciones. La función fuente $J_\lambda = \frac{j_\lambda}{k_\lambda}$ nos permite reescribir la Ecuación 1.1 para llegar a la Ecuación General de la Transferencia Radiativa sin ningún sistema de coordenadas [Liou, 2002]:

$$\frac{dI_\lambda}{k_\lambda \rho ds} = -I_\lambda + J_\lambda. \quad (1.2)$$

1.1.2. Ley de Beer-Bouguer-Lambert

Debido a que la emisión por parte de la atmósfera es despreciable en el rango de longitudes de onda del espectro solar, se podrá obviar el segundo término de la Ecuación 1.2. Integrando la

Ecuación 1.2 entre la parte más alta de la atmósfera (s_1) y la superficie terrestre (s_2), se obtiene que para una longitud de onda dada λ [Liou, 2002]:

$$I_\lambda(s_2) = I_\lambda(s_1) \exp\left(-\int_{s_1}^{s_2} k_\lambda \rho ds\right). \quad (1.3)$$

Para simplificar la ecuación se define la integral de camino $u = \int_{s_1}^{s_2} \rho ds$, suponiendo un medio homogéneo en el que la sección eficaz de extinción másica (k_λ) es independiente de la altura s , y se llega así a la conocida como **ley de Beer-Bouguer-Lambert**[Liou, 2002]:

$$I_\lambda(s_2) = I_{0,\lambda}(s_1) \exp(-k_\lambda u). \quad (1.4)$$

Esta ley establece que la intensidad de un haz de luz monocromática, que incide perpendicular sobre una muestra, decrece exponencialmente con la concentración de la muestra, es decir, con el producto de la sección eficaz de extinción y la longitud del camino recorrido. [J.Antuña, 2022]

1.1.3. Espesor óptico total: TOD

El espesor óptico total representa la extinción de la radiación como consecuencia de la dispersión y absorción espectral de las partículas atmosféricas, normalizada en la columna atmosférica. También es un indicador de la carga de aerosoles en la atmósfera [Liou, 2002]. Desde la superficie terrestre es posible medir la cantidad de irradiancia directa disipada a lo largo de su paso por la atmósfera (F), y al compararla con la irradiancia extraterrestre (F_o), llegamos a la conocida forma de la ley de Beer-Bouguer-Lambert[Liou, 2002]:

$$F = F_o e^{-\tau m}, \quad (1.5)$$

donde m es la masa óptica, definida como la razón entre el espesor óptico en la vertical y en una dirección determinada y τ es el espesor óptico total.

Si se asume el modelo de la atmósfera planoparalela, es posible expresar la masa óptica en función del ángulo cenital solar θ en grados sexagesimales. La primera igualdad se puede emplear hasta $\theta = 60^\circ$, a partir de ese valor se emplean fórmulas empíricas, un ejemplo es la de Kasten y Young, como muestra la segunda igualdad de la Ecuación 1.6 [Toledano Olmeda et al., 2005]:

$$m = \sec(\theta) \approx \frac{1}{\cos(\theta) + 0,50572 \cdot (1,46468 - \theta)^{-1,6364}}. \quad (1.6)$$

Es posible obtener el espesor total de la atmósfera a partir de la ley de Beer-Bouguer-Lambert [Liou, 2002]:

$$\tau = -\frac{1}{m} \ln\left(\frac{I}{I_o}\right). \quad (1.7)$$

Esta es la magnitud utilizada a lo largo de todo el trabajo. No obstante, es importante tener en cuenta que está compuesta por contribuciones de los aerosoles (τ_a), del scattering de Rayleigh (τ_R) y de las absorciones de gases (τ_g):

$$\tau = \tau_a + \tau_R + \tau_g. \quad (1.8)$$

1.2. Aerosoles atmosféricos

1.2.1. Distribución de tamaños

En primer lugar es importante definir **la distribución de tamaños (del inglés, Size Distribution SD)** [Dubovik et al., 2002], ya que es la base para derivar el resto de las propiedades ópticas de los aerosoles a través de la teoría de dispersión (scattering). El tamaño de los aerosoles puede variar desde centésimas de micrómetros hasta decenas de micras, dividiéndolos en dos grupos en función de su tamaño:

Los aerosoles del modo fino tienen un radio menor a $0,5\mu m$. Tener un tamaño menor les permite permanecer más tiempo en suspensión en la atmósfera. Este grupo contiene los aerosoles de *origen antropogénico* principalmente.

Los aerosoles del modo grueso (coarse) tienen un radio mayor a $0,5\mu m$ por lo que se suelen depositar rápido. Este grupo contiene gran parte de los aerosoles de *origen natural*, como pueden ser los aerosoles marinos, polen o polvo desértico.

La distribución de tamaños volumétrica se suele modelizar con una distribución lognormal bimodal [Dubovik et al., 2002] respecto al logaritmo del radio $\frac{dV}{d\ln(r)}$ como se muestra en la Ecuación 1.9:

$$\frac{dV}{d\ln(r)} = \frac{VC_F}{\sqrt{2\pi}\sigma_F} \exp\left[-\frac{(\ln r - \ln R_F)^2}{2\sigma_F^2}\right] + \frac{VC_C}{\sqrt{2\pi}\sigma_C} \exp\left[-\frac{(\ln r - \ln R_C)^2}{2\sigma_C^2}\right], \quad (1.9)$$

donde VC es la concentración en volumen total; R es el radio modal de la distribución y σ es la desviación estandar de cada distribución log-normal. Los subíndices F y C hacen referencia al modo fino y grueso respectivamente.

Esta distribución de tamaños también se puede calcular en intervalos triangulares, por ejemplo en 22 divididos en 10 para el modo fino y 15 para el modo grueso, tres de ellos solapan puesto que son una combinación de ambos modos. Se trata de una distribución continua como se puede ver en la Figura 1.2.

1.2.2. Absorción y forzamiento radiativo.

La **absorción** de los aerosoles contribuye al calentamiento o enfriamiento de la atmósfera y nos permite clasificar los aerosoles en función de su contribución al balance radiativo Tierra-atmósfera, es decir, del forzamiento radiativo.

El *forzamiento radiativo* es el cambio en el flujo neto de la energía radiativa (diferencia entre la luz solar absorbida por el sistema Tierra-atmósfera y la energía irradiada de vuelta al espacio) debido a cambios internos en la composición atmosférica o en el aporte de energía solar.

Si los aerosoles son muy absorbentes, contribuyen al calentamiento de las masas de aire en las que se encuentran y, por ende, al calentamiento global. Por tanto se produce un forzamiento radiativo positivo. En cambio si son poco absorbentes, contrarrestarán parcialmente el calentamiento global, permitiendo que una parte de la radiación neta que llega a la Tierra se disperse de vuelta al espacio, produciéndose un forzamiento radiativo negativo.

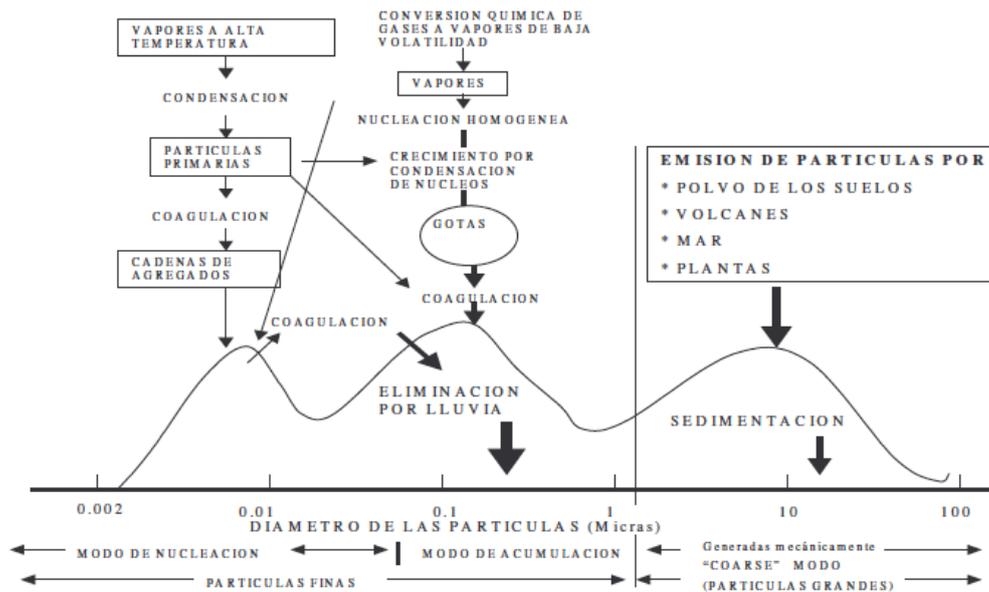


Figura 1.2: Esquema de la distribución de tamaños típica de los aerosoles en el que se pueden apreciar los dos modos así como los mecanismos de formación y eliminación en la atmósfera [Toledano Olmeda et al., 2005].

1.2.3. Scattering (dispersión).

El **scattering** es la dispersión de la energía de una onda electromagnética por una partícula, a lo largo del trabajo se trabajará con esferoides [Mishchenko et al., 1997]. El scattering de los aerosoles es importante, puesto que una parte de la dispersión de radiación se produce por estos medios.

Dependiendo de la proporción entre la longitud de onda y radio de las partículas se define el parámetro de tamaño ($x = \frac{2\pi r}{\lambda}$). El scattering puede ser despreciable ($x \ll 1$), seguir la teoría de scattering de Rayleigh ($x < 1$) o de Mie ($x \geq 1$), o las leyes de óptica geométrica ($x \gg 1$). En lo que respecta a la interacción entre la radiación solar y aerosoles, el caso ideal es el scattering de Mie. En este caso, la longitud de onda es comparable al tamaño del aerosol, la interacción es máxima y se favorece la dispersión en el sentido de incidencia de la radiación. Para los gases nos encontramos casos de scattering de Rayleigh. (Figura 1.3).

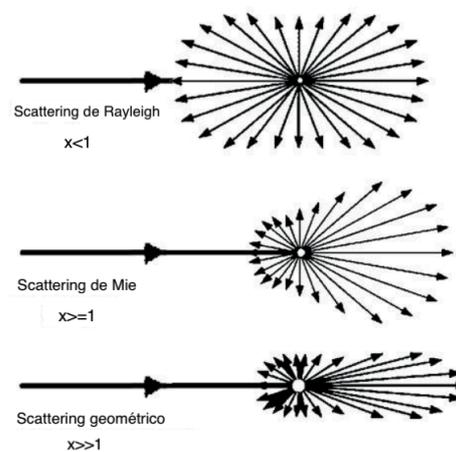


Figura 1.3: Distribución de la radiación dispersada en el scattering de Rayleigh, de Mie y en óptica geométrica. Fuente: <https://biblat.unam.mx/hevila/RevistaCintex/2015/vol20/no1/3.pdf>

1.2.4. Albedo de dispersión simple

Por último se define el **albedo de dispersión simple**, como la extinción dispersada entre la suma de la extinción dispersada y la absorbida, como se muestra en la Ecuación 1.10.

Es una medida importante para comprender la interacción de la radiación solar con las partículas atmosféricas que se define específicamente para la dispersión de la radiación en una sola interacción con las partículas:

$$\omega_o = \frac{\sigma_{sca}}{\sigma_{sca} + \sigma_{abs}}, \quad (1.10)$$

donde ω_o es el albedo de dispersión simple, σ_{sca} es la extinción de dispersión en todas las direcciones y σ_{abs} es la extinción de radiación causada por la absorción.

El SSA es una cantidad adimensional que varía de 0 a 1. Un albedo de dispersión simple alto, próximo a uno, implica un aerosol muy poco absorbente mientras que un albedo de 0 representará un aerosol puramente absorbente. [Liou, 2002]

El SSA es especialmente relevante en el estudio de los aerosoles y su impacto en el clima y la calidad del aire. Comprender el SSA ayuda a comprender el papel de las partículas en los procesos de transferencia radiativa y su influencia en el equilibrio energético de la Tierra.

1.3. Vapor de agua

El vapor de agua es un elemento clave en la Tierra ya que juega un papel importante en el ciclo hidrológico y esto afecta el clima terrestre. Cabe destacar que el vapor de agua es el elemento gaseoso con efecto invernadero más importante del rango de longitudes de onda visibles y del infrarrojo cercano. Se complementa con el espectro de absorción del oxígeno y el ozono para longitudes de ondas en el rango del ultravioleta. La Figura 1.4 muestra el espectro de absorción de los gases de efecto invernadero más relevantes así como el espectro de absorción total de la atmósfera y es apreciable que muestra una gran similitud con el del vapor de agua, añadiendo pequeñas franjas de absorción adicionales pertenecientes a otros gases. [Pérez-Ramírez et al., 2014]

El vapor de agua es el absorbente más importante en la región infrarroja próxima. En la Figura 1.4 se puede observar que sus bandas de absorción, que son el resultado de las transiciones rotacionales y vibracionales, están centradas en 940 nm, 1100, 1380, y 1870 nm.

Una de las formas más comunes de la caracterización del vapor de agua es el **vapor de agua**

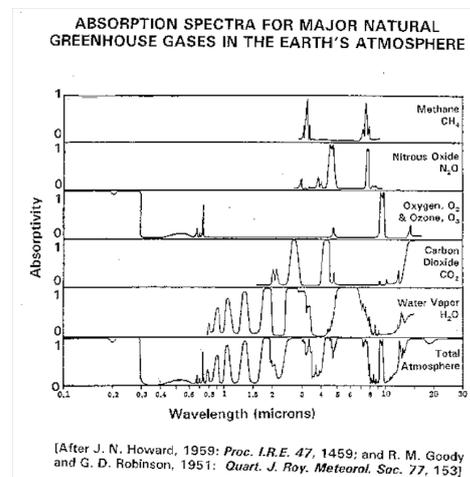


Figura 1.4: Espectro de absorción de distintos gases de efecto invernadero, entre los que podemos ver el espectro de absorción del vapor de agua. https://meteor.geol.iastate.edu/gccourse/forcing/forcing_lecture_es.html

precipitable (W), que se define como la cantidad total de vapor de agua atmosférico contenido en una columna vertical de sección transversal unitaria, extendiéndolo en términos de la altura a la que esa sustancia de agua se mantendría si se condensara por completo y se recogiera en un recipiente de la misma sección transversal.[Pérez-Ramírez et al., 2014]

1.4. Tipos de aerosol

Los aerosoles se han clasificado en 4 tipos de escenarios dependiendo de su procedencia, facilitándose así el estudio de su impacto en el clima y en el forzamiento radiativo:

1.4.1. Aerosol producido por la quema de biomasa

Los aerosoles producidos por los incendios y la quema de biomasa pertenecen a los aerosoles del modo fino.[Toledano Olmeda et al., 2005] Su producción se ocasiona principalmente en Sudamérica y África. Es necesario tener en cuenta que estos aerosoles no se producen únicamente por incendios naturales o provocados, sino que a día de hoy se emplean combustibles de biomasa para generar energía térmica y eléctrica, por lo que actualmente se encuentran gran variedad de aerosoles producidos por la quema de biomasa en la atmósfera.

Este tipo de aerosoles están compuestos principalmente por carbono marrón y son muy absorbentes. Esto resulta en un forzamiento radiativo positivo, que implica un aumento en la temperatura del sistema Tierra-atmósfera. En los últimos años con el incremento de los incendios forestales se ha aumentado mucho la cantidad de aerosoles emitidos a la atmósfera, incentivando el calentamiento global. [Aernova, 2019]

Los aerosoles producidos por la quema de biomasa tienen además un peligro añadido asociado con la salud. Estas partículas pueden viajar por la atmósfera miles de kilómetros, en Europa llegan a día de hoy partículas de los incendios de Canadá y debido al pequeño tamaño de su radio penetran fácilmente en los pulmones y a través de los alveolos, en la sangre. En el 2021 los fallecimientos atribuidos directamente a la polución de los incendios ascienden a 33.500 por año en el mundo. Esta cifra ha ido creciendo a lo largo de los años y se espera que siga aumentando debido al incremento de los incendios como consecuencia del cambio climático.[Aernova, 2019]

Debido a que los aerosoles producidos por la quema de biomasa son del modo fino, eso permite alcanzar espesores ópticos muy alto y variable.[Toledano Olmeda et al., 2005]

Los escenarios simulados con aerosoles producidos por la quema de biomasa son (ver Figura 1.5):

- Brasil, bosque Amazónico.
- Brasil-Cerrado, savana de sudamérica.

1.4.2. Aerosol urbano industrial

Los aerosoles del tipo urbano-industrial son aquellos encontrados en las ciudades. Están producidos principalmente por la combustión de combustibles fósiles debido a la actividad industrial

y automovilística.[[Toledano Olmeda et al., 2005](#)]

Estos aerosoles pueden tener mayor o menor impacto en la atmósfera en función de los factores meteorológicos propios de la ciudad ya que factores como el viento o la humedad tendrán una gran influencia en la concentración y en el transporte de los aerosoles antropogénicos. [[Toledano Olmeda et al., 2005](#)]

Este tipo de aerosoles son muy absorbentes y producen un forzamiento radiativo positivo. Químicamente están compuestos principalmente por carbono negro, que es conocido como el agente de calentamiento global más importante tras el dióxido de carbono [[Aernova, 2019](#)].

Otra amenaza que producen estos aerosoles es el impedimento que ofrecen a la formación de nubes. A diferencia de otros aerosoles, como los de quema de biomasa que favorecen la formación de nubes y precipitación, los aerosoles urbano-industriales producen una reducción del régimen pluviométrico.[[Aernova, 2019](#)]

Generalmente tienen valores de AOD (Aerosol Optical Depth) altos para los meses estivales mientras que para los meses invernales, el AOD toma valores bajos. [[Toledano Olmeda et al., 2005](#)]
Como la gran mayoría de aerosoles de origen antropogénico, estos pertenecen al modo fino.

Los escenarios simulados con aerosoles urbano-industriales son:

- Francia, Paris-Creta.
- Estados Unidos, Greenbelt-Maryland.

1.4.3. Aerosol desértico

El aerosol desértico es uno de los más relevantes debido a su gran presencia en la atmósfera. Este tipo de aerosoles tienen un origen natural y pertenecen predominantemente a las partículas del modo grueso. Estos aerosoles son partículas de polvo mineral, generalmente compuestos por arcilla cuarzo y hematita (un tipo de óxido de hierro). Principalmente provienen del norte de África y del continente asiático.[[Toledano Olmeda et al., 2005](#)]

Generalmente, el aerosol desértico tiene una gran reflectividad especialmente a longitudes de onda altas, causando así un efecto de enfriamiento neto sobre el clima. Tras una tormenta desértica, una gran cantidad de aerosoles son enviados a la atmósfera; se estima que los aerosoles atmosféricos de este tipo han aumentado un 55 % desde épocas preindustriales. Debido a la gran concentración de estas partículas en la atmósfera y a su poder de dispersión, se estima que están enmascarando el efecto del cambio climático a escala global.[[Mariela, 2023](#)]

Los escenarios simulados con aerosoles desérticos son:

- Golfo Pérsico, Bahrain.
- Arabia Saudí, Pueblo Solar.

1.4.4. Aerosol oceánico o marítimo

Tanto en el Golfo Pérsico como en Arabia Saudí, predomina el aerosol desértico, no obstante es posible apreciar una contribución no despreciable de aerosol oceánico.

El aerosol marítimo es de origen natural y de tipo grueso.

En la Figura 1.5 podemos observar tanto el albedo de dispersión simple como la distribución de tamaños para cada uno de estos seis escenarios. Se puede observar claramente la influencia del modo simple y modo grueso para cada uno de los escenarios así como la disminución de TOD entre los escenarios del modo fino y los del modo grueso.

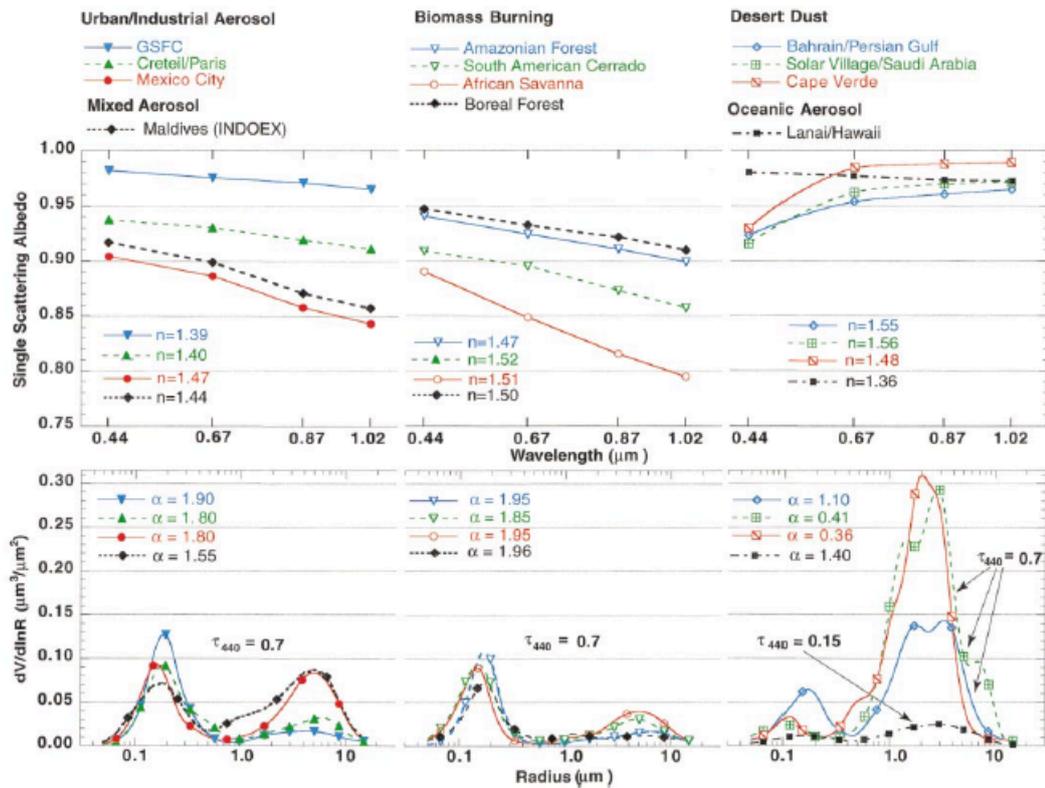


Figura 1.5: Representación del albedo de dispersión simple y de la distribución de tamaños para cada uno de los escenarios [Dubovik et al., 2002].

1.5. Objetivos

Los objetivos principales de este TFG son:

1. Configurar el código GRASP para la simulación de escenarios con aerosoles atmosféricos y vapor de agua en el canal asociado a 940 nm.
2. Simular las medidas para el TOD y la radiancia que tomaría un fotómetro solar CIMEL CE318 para seis escenarios atmosféricos diferentes. Cada escenario estará compuesto por distintos tipos de aerosol y diferentes concentraciones de vapor de agua.
3. Invertir simultáneamente los aerosoles y el vapor de agua atmosférico empleando las medidas sintéticas que se han simulado para el fotómetro. Realizar el análisis y caracterizar la incertidumbre de los parámetros atmosféricos obtenidos.

2. INSTRUMENTACIÓN.

En este trabajo, se ha realizando un análisis de datos de distintas medidas atmosféricas: la radiancia y el TOD. Estas medidas han sido simuladas imitando las medidas que se obtendrían empleando un CIMEL CE318. Este es el fotómetro solar estándar empleado en todas las estaciones de la red de AERONET (AErosol RObotic NETwork [Holben et al., 1998]) que fue diseñado en Paris por la empresa *Cimel Electronique*. [Holben et al., 1998]

2.1. Descripción general

AERONET (<https://aeronet.gsfc.nasa.gov/>) es la red para medidas de fotómetros más importantes, que consta de más de 500 fotómetros repartidos por todo el mundo, su instrumento estandar es el fotómetro CIMEL CE318. El **CIMEL CE318** es uno de los fotómetros más empleados debido a que, este espectrorradiómetro automático y de campo, es un instrumento de medida automática y autónoma de la radiancia solar directa y de cielo. Funciona empleando energía solar o con alimentación de una fuente eléctrica y es resistente al campo. Para prevenir la corrosión por lluvia, contaminación o partículas, la cabeza descansa apuntando hacia el punto nadir, el más bajo, cuando se encuentra inactivo. Además todos los componentes de la cabeza del sensor se encuentran aislados frente a la humedad y desecados para prevenir daños a las componentes electrónicas y a los filtros de interferencia. [Holben et al., 1998]

El CIMEL CE318 se compone de tres elementos principales: la cabeza, el robot y la unidad de control.

La cabeza es la parte frontal del instrumento. Está equipada con un colimador acoplado a unas lentes ópticas encargadas de detectar la luz. Dentro de la cabeza, la luz atraviesa una rueda de filtros que permite seleccionar distintas longitudes de onda. Posteriormente, la luz filtrada llega a dos sensores distintos situados en la cabeza del instrumento que miden la radiación en distintas longitudes de onda comprendidas en un rango que va desde la región ultravioleta (UV) hasta el infrarrojo cercano (IR cercano). [Román et al., 2018] Se logra obtener mediciones precisas y confiables, permitiendo un análisis más completo de la radiación presente en la atmósfera.

La información capturada por los sensores del CE318 es procesada y controlada por la unidad de control. Esta unidad es responsable de gestionar los datos recopilados, realizar ajustes y calibraciones necesarias, y garantizar la correcta operación del instrumento en su conjunto.



Figura 2.1: CIMEL CE318, de la Universidad de Valladolid realizando medidas de la radiancia del cielo.

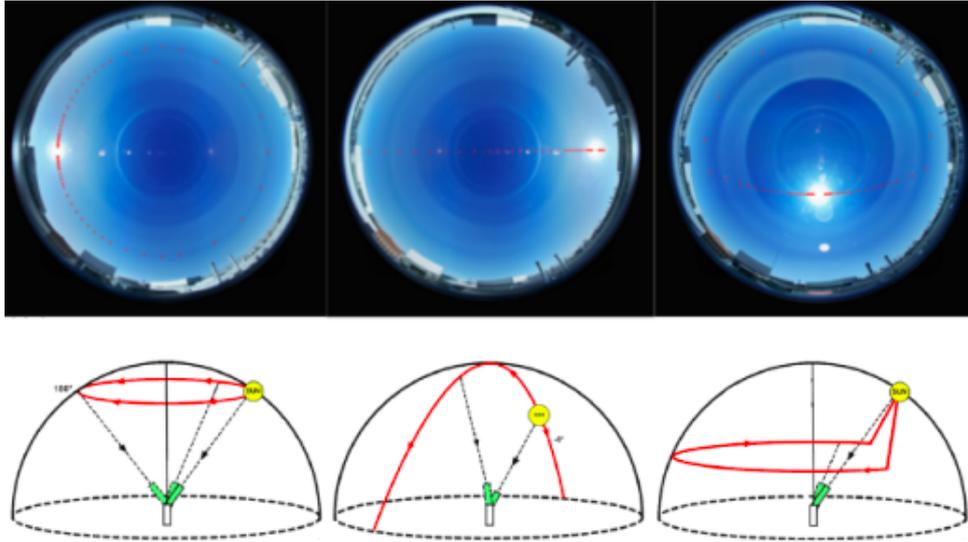


Figura 2.2: Esquema de los planos almucantar, principal e híbrido realizados por los fotómetros CIMEL. En la parte superior se muestran los ángulos medidos en cada caso. [González Catón et al., 2021]

2.2. Medidas

Este fotómetro está diseñado para medir tanto la *irradiancia solar* como la *radiancia del cielo* en un amplio rango de longitudes de onda, que se obtienen gracias a filtros interferencialmente estrechos que definen los canales. Las longitudes de onda típicas de los canales del CE318 son: 340, 380, 440, 500, 675, 870, 940, 1020 y 1640 nm [Román et al., 2018]. Modelos más recientes como el CIMEL CE318-T son capaces de realizar medidas también a la Luna [Román et al., 2018]. Para la medida de los parámetros atmosféricos, el fotómetro CE318 tiene 1.2° de ángulo de visión completa y es capaz de medir la aureola solar y la radiancia del cielo y la irradiancia directa respectivamente. Además, el fotómetro se instala sobre un robot seguidor solar, que permite el movimiento sobre el eje cenital y sobre el eje acimutal [Holben et al., 1998]. Esta geometría se muestra en la Figura 2.2 y en la Figura 2.3.

GRASP geometry definition

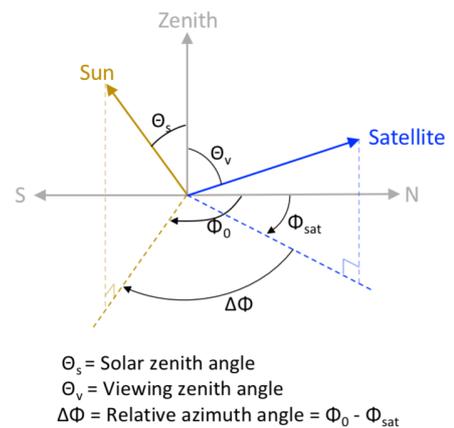


Figura 2.3: Definición de los ángulos acimutal y cenital de GRASP.

2.2.1. Medidas de irradiancia directa solar

Las medidas de irradiancia directa solar están realizadas en 8 bandas espectrales que se encuentran entre los 340 nm y 1640 nm [Román et al., 2018]. La medida solar básica tarda 8 segundos en realizarse para las 8 longitudes de onda, aunque también se realiza de forma común la observación del triplete, que consiste en tres medidas directas del sol a cada longitud de onda con una cadencia de 30 segundos [Holben et al., 1998].

2.2.2. Medidas de la radiancia del cielo

Las medidas de la radiancia del cielo, por su parte, se realizan a 440 nm , 675 nm , 870 nm y 1020 nm , en los modelos más nuevos también se mide a 380 , 500 y 1640 nm [González Catón et al., 2021]. A lo largo del trabajo se ve que estos canales nos permiten estudiar de forma efectiva los aerosoles atmosféricos. A mayores, se estudia el canal 940 nm , que es el que nos permite observar el vapor de agua atmosférico.

Las medidas de la radiancia del cielo se obtienen a través de la obtención de las cantidades de luz dispersada en un amplio rango de ángulos de scattering que contienen una información valiosa sobre la función de fase de scattering de los aerosoles, la cual es muy útil para hallar los parámetros atmosféricos de la distribución de tamaños, la función de fase y el albedo de dispersión simple. Para obtener la radiancia en los distintos ángulos de scattering, el fotómetro CE318 puede emplear tres geometrías diferentes, cuyo uso se decide de acuerdo a la posición solar (Figura 2.2) [González Catón et al., 2021]:

- **El plano principal:** es un plano que se puede emplear cuando la elevación solar se encuentra entre 4° y 79° , es decir, la mayor parte de las veces. Al emplear esta geometría, el ángulo *acimutal* del instrumento toma un valor constante igual al ángulo solar acimutal. Por su parte, el ángulo *cenital* varía.
- **La geometría almucántar:** es una geometría que se puede emplear cuando la elevación solar está entre los 38° y 82° . En esta geometría el ángulo *cenital* del instrumento toma un valor constante igual al ángulo solar cenital. Por su parte el ángulo *acimutal* describe una semicircunferencia, tomando valores entre 180° y 340° . Este es el plano con el que se han obtenido los datos analizados en el trabajo.
- **La geometría híbrida:** es un plano que se puede emplear cuando la elevación solar se encuentra entre 4.5° y 72° . Esta geometría está caracterizada por variar tanto el ángulo *acimutal* como el ángulo *cenital* hasta barrer un número dado de ángulos de scattering. Inicialmente varían los ángulos *cenital* y *azimutal* hasta que toman un valor de 75° , entonces varía únicamente el ángulo *acimutal*.

2.3. Salida de datos

El fotómetro CE318 permite descargar los datos directamente en un ordenador, desde donde se dirigen a AERONET o al servidor pertinente para su posterior análisis. [González Catón et al., 2021]

El procesamiento de datos de AERONET está centralizado y se realiza en los servidores del Goddard Space Flight Center en Washington DC, Estados Unidos, que son las fuentes de datos oficiales.

2.4. Calibración y errores

La calibración de los CIMEL es crucial, para prevenir al máximo los errores asociados al instrumento de medida. Todos los instrumentos se calibran de forma regular siguiendo el procedi-

miento estandarizado por intercomparación de la irradiancia solar y mediante la esfera integrada de Ulbricht para las medidas de radiancia del cielo; para asegurar su buen funcionamiento, los fotómetros de observación se calibra una vez al año, mientras que los de referencia se calibran una vez al mes [González Catón et al., 2021].

Debido a la variedad de causas que provocan los errores, no es posible asociar un valor preciso a cada una de las causas, pero la comunidad científica estima que la incertidumbre típica para el espesor óptico de los aerosoles es de $\pm 0,01$ para las longitudes de onda mayores de 440 nm y de $\pm 0,02$ para las longitudes de onda menores. Por su parte, para las mediciones de la *radiancia*, la incertidumbre estimada toma un valor $\pm 5\%$ [Holben et al., 1998].

3. METODOLOGÍA.

3.1. GRASP

A lo largo del trabajo se han procesado los datos empleando el algoritmo de GRASP [Dubovik et al., 2021]. Es un algoritmo que invierte medidas radiativas para el cálculo de propiedades ópticas y micro-físicas de los aerosoles y de otros componentes atmosféricos y terrestres como el albedo de la superficie [Dubovik et al., 2021]. GRASP tiene dos módulos: **módulo de transferencia radiativa (*forward*)** y **módulo de inversión numérica**. Se trata de un algoritmo versátil, de código libre, abierto y gratuito (<https://www.grasp-open.com/>).

Antes de continuar es necesario tener claro la diferencia entre problema directo e inverso:

- Un problema directo trata de determinar los resultados de un sistema dado. A partir del conjunto conocido de variables de entrada se consigue predecir los efectos observables.
- El problema inverso determina las causas o condiciones iniciales desconocidas de un sistema a partir de los resultados observables. A partir de una respuesta observable se emplea un proceso de inferencia para hallar las condiciones iniciales que más se ajusten.

Un ejemplo muy utilizado para explicar este proceso es la metáfora del dragón; el *módulo forward* es el más sencillo y simple de entender puesto que es el equivalente a viendo un dragón, podemos saber que huellas va a dejar, como pueden ser sus excrementos, el color de sus escamas, el fuego que escupa, etc. Por su parte el problema de *inversión* es el procedimiento opuesto; conocidas las huellas o las quemaduras, saber de qué dragon se trata [Bohren and Hufmann, 1983].

Este se trata de un problema **ill posed**, es decir un problema mal definido, puesto que no cumple la condición de unicidad de la solución. Para unas medidas de radiancia, existen más de una combinación de aerosoles posibles para su obtención.[Dubovik et al., 2021]

3.1.1. Módulo de transferencia radiativa (*forward model*)

El *forward model* se encarga de implementar simulaciones de las observaciones realizadas empleando sensores remotos para obtener la radiación atmosférica resultante de la interacción de la luz incidente con la atmósfera y la superficie terrestre. Esta implementación se basa en los modelos de aerosol atmosférico y transferencia radiativa explicados en la introducción.

El modelo de transferencia radiativa de GRASP está compuesto de varios módulos que se encargan de simular: el scattering múltiple y scattering simple, el perfil de aerosoles en columna (que se asumen una mezcla de varios componentes con partículas que tienen posiblemente distinta forma) y de los cálculos de reflectancia superficial y de absorción de gases.

Con la ventaja de que los módulos son semi independientes, es decir, cada bloque se puede reemplazar completa o parcialmente sin apenas tener efecto en el funcionamiento del *forward model*.

3.1.2. Módulo de inversión numérica (inversion model)

El **módulo de inversión** parte de unas medidas del TOD y radiancia de un fotómetro CE138 y obtiene los parámetros medibles de la atmósfera [Dubovik et al., 2021]. Debido a su versatilidad se pueden usar otro tipo de medidas aunque estas dos son las empleadas en este trabajo.

Para conseguir recuperar los parámetros atmosféricos, se incluyen operaciones numéricas generales que hacen coincidir de forma óptima las observaciones con las simulaciones. En el módulo de inversión se emplea el método LSM (Least Square Method) multitérmino (MLSM) cuya finalidad es dotar a GRASP de la capacidad de incluir múltiples condiciones iniciales para ejecutar la inversión trabajando en el marco del método de máxima verosimilitud (MML) [Dubovik et al., 2021]. No obstante, a diferencia del método LSM original, el algoritmo emplea el método iterativo de Levenverg-Marquardt en lugar del método de Gauss-Newton ([J.Antuña, 2022], [Dubovik et al., 2021])

Método de LSM

Para la resolución de un problema inverso, partimos de:

$$f^* = f(a) + \Delta f^*, \quad (3.1)$$

donde f^* es el vector que representa el efecto, o lo que es lo mismo, las observaciones atmosféricas; a es el vector que representa la causa, en este caso, las propiedades de los aerosoles; f es el operador matemático de la transferencia radiativa, que aplicado a las propiedades nos devuelve el vector efecto y finalmente Δf^* representa el error asociado a cada medida experimental. Como podemos ver, en este caso, el vector efecto estará compuesto por el vector observaciones o medidas ($f(a)$) así como por su error asociado (Δf^*). [J.Antuña, 2022]

Método lineal

En el caso de que Δf^* fuese despreciable, es decir, si las observaciones no tuviesen ningún el problema fuera lineal tal que $f(a) = Ka$, las propiedades de los aerosoles se obtendrían directamente empleando el operador transferencia radiativa K ; si K se trata de un operador cuadrado, se tendría que $a = K^{-1}f$. No obstante, si K no fuese cuadrada, la solución del problema vendría dada a través de la Pseudoinversa Moore-Penrose (Penrose, 1955), de forma que a quedaría definida como $A = (K^T K)^{-1} K^T f^*$, esta es una solución equivalente a un ajuste por mínimos cuadrados. [J.Antuña, 2022]

En el caso de tener un problema mal definido, es decir, cuando el $\det(KK^{-1}) = 0$, será necesario abordar el problema empleando otras alternativas. Una de los métodos más empleados es a través del error de las medidas Δf^* . Asumiendo que el error de las medidas es aleatorio y conocida la densidad de probabilidad de ese error, $P_D(\Delta f^*) = P_D(f^* - f(a)) = P_D(f(a)|f^*)$, es sabido que según *el método de máxima verosimilitud*, este valor será máximo cuando la densidad de probabilidad describa correctamente los errores de las observaciones.

Como es posible ver en [Dubovik et al., 2021], una buena descripción de los errores en las observaciones viene dada cuando la función densidad de probabilidad es una Gaussiana o función

normal:

$$P_D(f(a)|f^*) = [(2\pi)^m |C|]^{\frac{1}{2}} \exp[-\frac{1}{2}(f(a) - f^*)^T C^{-1}(f(a) - f^*)], \quad (3.2)$$

para que esta describa de forma óptima el error de las observaciones, esta distribución ha de ser máxima, por lo que el siguiente paso natural será minimizar el valor absoluto del exponente de la exponencial, llegando así a la solución

$$a = (K^T C^{-1} K)^{-1} K^T C^{-1} f^*. \quad (3.3)$$

donde K es la matriz transferencia radiativa y C es la matriz covarianza. En esta solución, a diferencia de en el ajuste por mínimos cuadrados, cada observación está asociada a un peso gracias a la matriz covarianza. Se trata por lo tanto de un ajuste por mínimos cuadrados ponderado de forma que cada medida dependa de su error [J.Antuña, 2022].

En el caso que nos atañe la solución es más compleja al no tratarse de una función lineal en la transferencia radiativa. Debido a su complejidad para maximizar la Ecuación 3.2 se emplea el método de Levenberg-Marquadt [J.Antuña, 2022].

Este método supone que para cada intento de resolución de la ecuación, es decir para cada iteración p , se obtiene una solución $a_{p+1} = a_p - \Delta a_p$ de forma que vaya siendo más exacta y que diferirá Δa_p de la anterior. Sea

$$\Delta a_p = (J_p^T C^{-1} J_p)^{-1} \nabla \Psi(a) = (J_p^T C^{-1} J_p)^{-1} [J_p^T C^{-1} (f(a_p) - f^*)].$$

donde J_p es la matriz jacobiana de $f(a)$ y ψ es el exponente de la exponencial que aparece en la Ecuación 3.2.

El proceso iterativo se realizará tomando una solución inicial a_0 para $p = 0$ e iterando hasta o bien llegar a una reducción en el residuo Δf menor que un valor umbral determinado o bien llegar a un número máximo de iteraciones fijado en el caso de este trabajo, el máximo número de iteraciones es $N = 15$. Cuando se cumpla una de estas dos condiciones, el proceso finalizará tomando $p = N$ como la iteración final, la solución Gauss-Newton será el valor a_{N+1} .

Una de las mayores ventajas de este método es el bajo coste computacional que tiene puesto que solo es necesario calcular las matrices jacobianas J en unos puntos, posteriormente la transferencia radiativa se realizará únicamente para esos puntos y puntos próximos que nos permitan calcular las derivadas.

Debido a la dificultad asociada al problema, GRASP emplea el método multitérmino, que permite emplear observaciones de distintos tipos, como el AOD y las radiancias, a las que se les asignan distintos errores Δ_f . Para determinar la atmósfera asociada a cada escenario las medidas atmosféricas se clasifican en K subconjuntos, cada uno de ellos asociado a un error relativo distinto e independiente de los demás.[J.Antuña, 2022] Gracias a este concepto multitermino GRASP es capaz de añadir ligaduras como hacer que la solución final se parezca mucho o poco a una introducida a priori, o la exigencia de que algunas propiedades obtenidas varien poco con algún parámetro final, como el caso de la variación del índice de refracción con la longitud de onda que se puede exigir que sea más suave o más abrupta.

3.2. Estrategia

Como se acaba de mencionar, GRASP tiene dos módulos; el de transferencia radiativa y el de inversión numérica. Este trabajo será una combinación de ambos módulos. En la Figura 3.1 podemos observar un esquema que muestra el procedimiento seguido.

Como se explicará a continuación, primeramente se emplea el módulo de transferencia radiativa, correspondiente a la fila superior de la Figura 3.1, para generar seis escenarios sintéticos con tres tipos de aerosoles distintos y una concentración de vapor de agua dada para cada escenario; quema de biomasa, urbano industrial y oceánico. Una vez simulados los escenarios se pueden tomar dos recorridos:

El primero es invertir las observaciones simuladas sin la adición de ruido, este paso implica que los rectángulos correspondientes a *synthetic observations* y *synthetic INPUT observations* de la Figura 3.1 coinciden, por lo que es posible obtener directamente los parámetros atmosféricos de cada escenario.

El segundo recorrido posible es realizar 50 adiciones de ruido aleatorio a las medidas del TOD y la radiancia de los distintos escenarios simulados para dotarlos de un mayor realismo, esto viene representado por el círculo verde situado a la derecha de la Figura 3.1 y posteriormente empleando el módulo de inversión numérica se buscan unas condiciones iniciales que nos permitan obtener los parámetros atmosféricos de todos los escenarios simultáneamente.

El bucle de abajo representa un análisis de los residuos en función de los parámetros atmosféricos que definen cada escenarios.

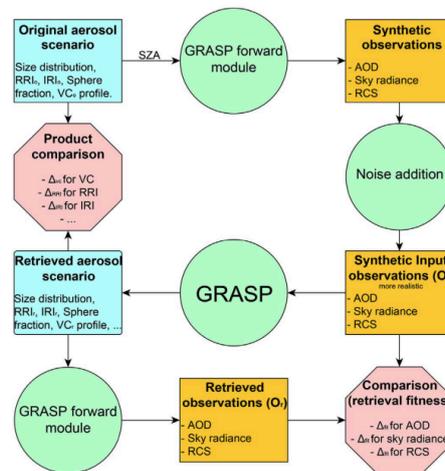


Figura 3.1: Proceso de la realización del trabajo, en la parte superior se muestra el módulo de forward, a la derecha se puede apreciar la introducción de ruido, en la parte inferior cada una de las iteraciones del módulo de inversión y en la parte izquierda la comparación de los escenarios originales y los recuperados. Figura extraída de [Román et al., 2018].

3.2.1. Puesta en uso del Módulo forward: transferencia radiativa.

En primer lugar se emplea el módulo de transferencia radiativa (*forward module*) tomando las propiedades de los aerosoles para cada uno de los escenarios utilizados: Greenbelt (Maryland), Creta Paris (Francia), Bosque Amazónico (Brasil), South American Cerrado (Brasil), Bahrain (Golfo Pérsico) y Solar Village (Arabia Saudí), del paper [Dubovik et al., 2002] para obtener un archivo que contenga las observaciones sintéticas cada escenario.

Los datos que se introducen para conseguir las medidas sintéticas que simulan las obtenidas por un fotómetro CE318 son los parámetros atmosféricos relacionados de los aerosoles y una concentración del vapor de agua característica para cada escenario que toma los valores:

- Para Greenbelt: 3.12E+06 DU.
- Para Creta, París: 2.807E+06 DU.
- Para el Bosque Amazónico: 3.745E+06 DU.
- Para Cerrado, en América del Sur, Brasil: 3.433E+06 DU.
- Para Bahrain, Golfo Pérsico: 1.872E+06 DU.
- Para Solar Village, Arabia Saudí: 2.185E+06 DU.

El archivo obtenido se conoce como **SDATA** que contiene los valores de la radiancia empleando la geometría almucantar (valores del ángulo acimutal entre 180° y 340°) y los valores del TOD a 5 longitudes de onda, cuatro para los aerosoles $\lambda = 440 \text{ nm}$, 675 nm , 870 nm , 1020 nm y una quinta que nos permitirá invertir el valor del vapor de agua $\lambda = 940 \text{ nm}$.

Antes de realizar la introducción de ruido es posible comprobar que las inversiones de estos escenarios simulados son completamente coincidentes con los archivos introducidos, como se ilustrará posteriormente.

3.2.2. Introducción de ruido

Una vez se han obtenido las medidas sintéticas y generado los SDATAS pertenecientes a los 6 escenarios empleados, se ha realizado una adición de ruido; en los escenarios reales, las observaciones cuentan con un ruido añadido, de forma que este paso intermedio, dota de una mayor credibilidad / realidad a las medidas con las que se trabajan. El ruido de las medidas empleadas, *radiancia* y *TOD*, se trata de una distribución gaussiana en ambos casos, por lo que su introducción para una medida dada será simple; se creará una distribución gaussiana centrada en el valor de la medida al que se le introduce el ruido y la desviación estándar dependerá de si el ruido es relativo o absoluto.

Para el caso de la *radiancia del cielo*, el ruido es relativo y únicamente los canales asociados a los aerosoles tienen un valor de la radiancia asociado. Por lo tanto la desviación estándar es proporcional a la medida y vendrá dada por $\sigma = 0,03 \cdot i$.

Por su parte el *TOD*, está presente en los 5 canales, tanto de los aerosoles como del vapor de agua y su ruido es de carácter absoluto. Esto implica que la desviación estándar viene dada de forma absoluta y es una constante $\sigma = 0,005$.

La medida con ruido será un valor aleatorio seleccionado dentro de esta distribución. El proceso se repite 50 veces para obtener 50 casos de escenarios con ruido para cada uno de los 6 escenarios empleados; los arrays *ruidosos* se sobrescriben en un sdata, consiguiéndose así los 50x6 archivos de entrada que se emplearán en el siguiente paso.

3.2.3. Módulo de inversión numérica

Una vez obtenidos nuestros archivos de los escenarios con ruido, procedemos a emplear el módulo de inversión numérica. Este problema inverso tiene como finalidad a partir de los archivos SDATA ruidosos obtenidos, tratar de obtener las propiedades de los aerosoles en cada uno de los escenarios de la forma más exacta posible. Como se ha planteado antes, esto se trata de un problema mal definido (ill posed), hay múltiples configuraciones de los aerosoles y el vapor de agua que nos dan como resultados las mismas medidas de radiancia y TOD. Es por eso que se introducen unas estimaciones iniciales (initial guess), es lo que se ha definido como proceso de regularización.

Como parte del proceso de regularización, en un archivo .YAML se configuran las condiciones iniciales, este es el archivo SETTINGS. El archivo se centra en definir la estrategia de inversión empleada (número máximo de iteraciones), los parámetros de la transferencia radiativa (número de capas de la atmósfera, ...) los ruidos y las restricciones de seis características:

1. La concentración de vapor de agua.
2. La distribución de tamaños.
3. La fracción de concentración volumen de las partículas (la cantidad de partículas que hay en el aire).
4. La fracción de esfericidad.
5. El perfil vertical de los aerosoles.
6. Las condiciones de superficie.

En primer lugar, se definen las condiciones de ruido. Como se explicó previamente, GRASP emplea en el módulo de inversión la metodología de los mínimos cuadrados multitérmino, que clasifica las observaciones en K subconjuntos distintos en función del tipo de observación y de su error asociado. En el caso de este trabajo se definen 4 subconjuntos;

- $k=1$ es la radiancia en el canal 1 (a 440 nm), que tiene asociada una desviación estandar relativa de 0.02.
- $k=2$ es la radiancia en los canales 2, 3 y 5 (a 675 nm, 870 nm y 1020 nm) con una desviación estandar relativa asociada de 0.03, recordamos que el canal 4 (940 nm) no tiene radiancia asociada puesto que corresponde al vapor de agua.
- $k=3$ es el tod en los canales 1, 2, 3, 5 (440 nm, 675 nm, 870 nm y 1020 nm) asociados a los aerosoles, con una desviación estandar absoluta de 0.01.

- $k=4$ es el tod en el canal 4 (a 940 nm) asociado al vapor de agua, con una desviación estandard absoluta de 0.02.

Seguidamente, se definen las condiciones de las características prestando especial atención a la concentración de vapor de agua y a la distribución de tamaños. La **concentración de vapor de agua** es de vital importancia, porque es la principal novedad de este trabajo ya que es la primera vez que se invierte el vapor de agua y los aerosoles a la vez en contraposición de lo que hace AERONET [Pérez-Ramírez et al., 2014], que invierte primero los aerosoles y posteriormente el vapor de agua [Holben et al., 1998].

Generalmente, un menor número de asunciones en el metodo de inversion implica una mayor calidad de los productos obtenidos. Como condicion inicial tomamos un valor elevado de la concentración del vapor de agua ya que así no nos quedaremos en un mínimo local y llegaremos de forma más sencilla al valor real. El valor inicial de la concentración de vapor de agua fijado es una concentración de $5.7E07$ unidades dobson (DU), común para todos los escenarios.

Además, al comenzar cada inicialización de datos, el algoritmo necesita una estimación inicial para cada escenario. En estas estimaciones, todos los parámetros se asumen iguales exceptuando la distribución de tamaños, que se representa como una distribución trapezoidal proporcional a la medida para el AOD para una $\lambda = 440$ nm. A mayores, GRASP también da una estimación de los errores en los parámetros, estos pueden ser debidos a fuentes aleatorias y sistemáticas y su cálculo se puede observar en [Román et al., 2018].

También es crucial una buena distribución de tamaños inicial. La forma más empleada es un trapecio; los extremos tienen poca sensibilidad y por lo tanto se mantendrán con valores mínimos mientras que la parte intermedia tomará un valor inicial elevado que irá decreciendo a medida que el código ajusta los valores. Este valor intermedio será proporcional al TOD a 440 nm para cada escenario. Aunque a la hora de invertir se distingue entre dos modos (fino y grueso) y el archivo divide a su vez esta característica en dos modos, los valores iniciales de la distribución de tamaños en la región central no hacen esta distinción.

El resto de características, emplean como referencia el paper [Dubovik et al., 2002].

Una vez se tiene el archivo *SETTINGS*, con la estrategia de inversión y las condiciones iniciales bien definidas así como el archivo *SDATA* con las medidas pertinentes, se pone GRASP en funcionamiento. El algoritmo, empleando MLSM junto con el método iterativo de Levenberg-Marquardt, calcula unas propiedades que reproduzcan cada vez de forma más precisa las medidas aportadas por el *SDATA*, hasta que se alcance el número de iteraciones máximas definidas en *SETTINGS* o cuando el residuo entre dos iteraciones sea inferior a un umbral que también viene definido por el archivo anterior.

Al finalizarse este proceso, el algoritmo da como archivo salida el fichero *OUTPUT*. Los archivos *OUTPUTS* contienen la reproducción de las medidas de los aerosoles obtenidas en la última iteración y los residuos respecto de las medidas reales, así como una lista de parámetros detallados que se han podido invertir. Los parámetros invertidos a lo largo de este trabajo son:

- La distribución de tamaños para cada modo (fino y grueso).
- La concentración volúmica de aerosoles para cada modo.

- La concentración de vapor de agua.
- El porcentaje de esfericidad de las partículas.
- Los índices de refracción real e imaginario.

4. RESULTADOS

Como se ha explicado previamente, este trabajo tiene varias partes. En primer lugar se realiza la simulación de los distintos escenarios empleando el módulo forward de GRASP. A continuación se halla la inversión de los aerosoles junto con el vapor de agua empleando GRASP pero sin la adición de ruido. Posteriormente, se añade ruido a las simulaciones realizadas en la primera parte creando así 50 escenarios ruidosos para cada uno de los 6 escenarios originales. Finalmente se realiza la inversión de cada uno de estos casos y se estudia cada escenario por separado. En esta sección se presentarán los resultados obtenidos en cada caso.

4.1. Simulación (forward model)

Una vez simulados los seis escenarios propuestos por el artículo de [Dubovik et al., 2002] y mencionados en el capítulo anterior, se analizan los archivos SDATA generados por GRASP. Estos archivos contienen las observaciones sintéticas que mediría el fotómetro CE318 del TOD a 5 longitudes de onda y la radiancia del cielo únicamente a las longitudes de onda asociadas a los canales de los aerosoles.

En la Figura 4.1 que se presenta a continuación se muestran el TOD y la radiancia para las longitudes de onda de $\lambda = 440 \text{ nm}$, 1020 nm . Cada gráfica muestra el parámetro correspondiente para los seis escenarios.

Cada escenario está hecho para un AOD diferente y un SZA (Solar Zenit Angle) de 70° :

- Greenbelt tiene un $\text{AOD}(440\text{nm}) = 1.55$.
- Crete-Paris tiene un $\text{AOD}(440\text{nm}) = 0.0861$.
- El Bosque Amazónico tiene un $\text{AOD}(440\text{nm}) = 1.05$.
- South American Cerrado tiene un $\text{AOD}(440\text{nm}) = 0.728$.
- Bahrain tiene un $\text{AOD}(440\text{nm}) = 0.162$.
- Solar Village, Arabia Saudí tiene un $\text{AOD}(440\text{nm}) = 0,129$.

La Figura 4.1a muestra el TOD en función de la longitud de onda. Observamos que los cuatro escenarios con más TOD son los que representan aerosoles del modo fino: quema de biomasa y urbano industrial. Debido a que la eficiencia de interacción es mayor, para un mismo número de partículas, las contenidas en estos escenarios interaccionarán más con la luz por lo que serán más detectables. Por su parte los aerosoles de origen desértico, son del modo grueso, por lo que tendrán una eficiencia de interacción menor y serán menos detectables a longitudes de ondas cortas, a longitudes de onda largas, pasa al revés. Por último es necesario tener en cuenta que las partículas del modo fino debido a su tamaño son muy ligeras por lo que pueden permanecer más tiempo en la atmósfera, sin embargo las del tipo grueso son más pesadas por lo que precipitarán antes.

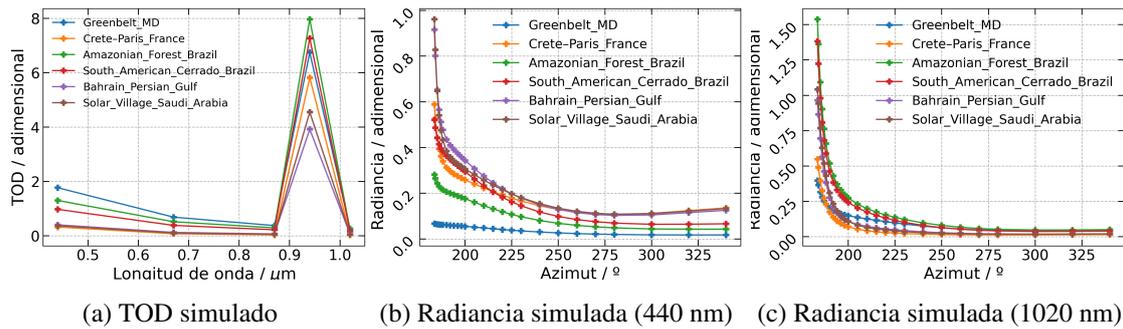


Figura 4.1: TOD y la radiancia del cielo normalizada para dos longitudes de onda; 440 nm y 1020 nm simulados para cada uno de los seis escenarios a partir de los datos extraídos de [Dubovik et al., 2002]. Cada uno de los colores representa un escenario, como se puede ver en las respectivas leyendas.

Es importante resaltar como el AOD (Aerosol Optical Depth), es máximo para las longitudes de onda menores y va decreciendo a medida que el radio de las partículas incrementa. No obstante se puede observar que el TOD en los canales de los aerosoles es prácticamente despreciable con respecto del TOD en el canal del vapor de agua, es decir, sobre el canal de 940 nm.

La gráfica ilustra perfectamente lo mostrado en la Figura 1.4 y es que el canal 940 nm es el canal de máxima absorción de vapor de agua, el que tiene mayor interacción con la radiación solar incidente. Esta concentración del gas que llevará a una percepción mínima de la radiancia solar podría hacernos pensar que es una pérdida de información, pero realmente es la gran absorción de radiación solar por este canal lo que nos da la información del vapor de agua existente.

Las Figuras 4.1b y 4.1c muestran la radiancia del cielo a dos longitudes de onda. Los ángulos más pequeños, cercanos a 180° son los que apuntan directamente a la aureola del Sol, por lo que son los que mayor radiancia detectarán. La radiancia irá decreciendo a medida que el fotómetro apunta en otras direcciones.

4.2. Inversión sin ruido

Tras realizar las simulaciones, se han invertido las medidas de radiancia y TOD para recuperar los parámetros atmosféricos iniciales. En este apartado se trabaja en condiciones ideales, por lo que al no haber ruido, se espera que los resultados de la inversión sean exactamente iguales o muy similares a los parámetros simulados inicialmente.

En la Figura 4.2 se muestra la diferencia en valor relativo, en porcentaje, de la radiancia simulada y la recuperada para las cuatro longitudes de ondas asociadas a los aerosoles ($\lambda = 440, 675, 870$ y 1020 nm) en todos los escenarios. Tal y como se ha predicho se puede apreciar que los datos de la radiancia simulados y recuperados son coincidentes en todos los casos; el producto recuperado es exactamente igual que el inicial.

En la Figura 4.3 se comparan las distribuciones de tamaños simuladas y obtenidas para comprobar que también son coincidentes y que por lo tanto se ha llegado a la solución óptima.

Debido a la diferencia de concentración de aerosoles en cada escenario, ha sido necesario

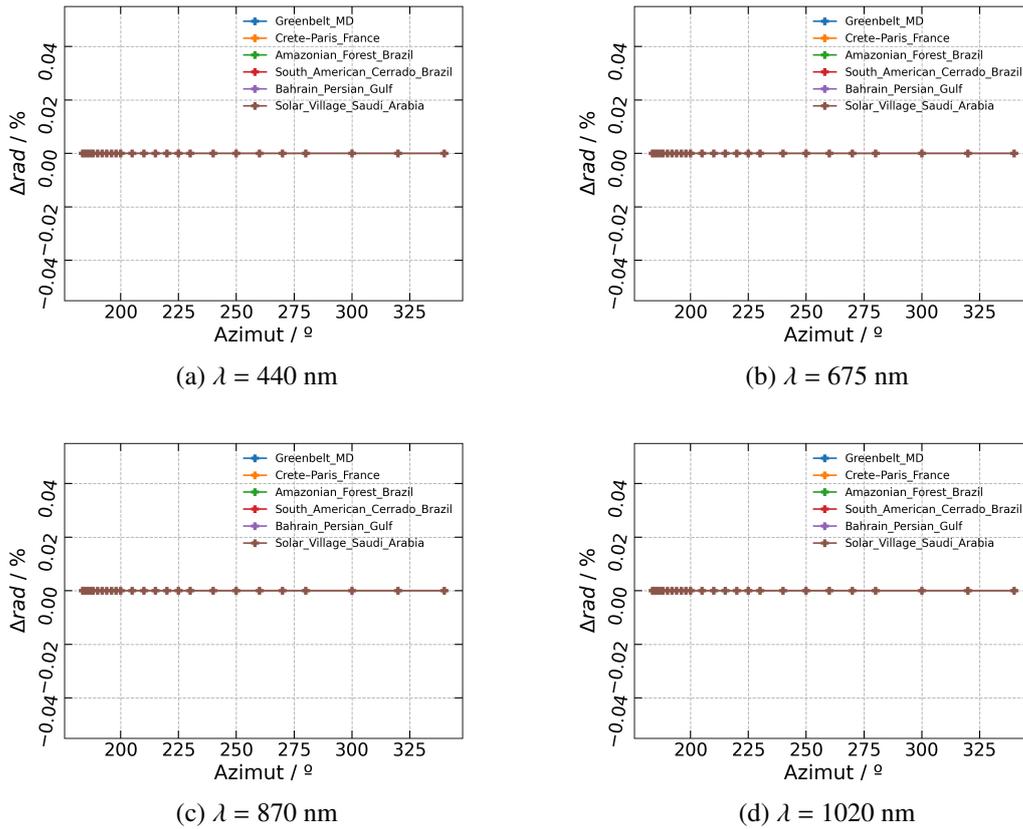


Figura 4.2: Variación de radiancia entre las medidas simuladas y los parámetros recuperados en un caso ideal, sin ruido. Se define $\Delta rad = |(I_{obtenida} - I_{simulada}) / (I_{simulada})| \cdot 100$. Cada una de las subfiguras muestran Δrad para una de las longitudes de onda perteneciente a los canales asociados a los aerosoles. Los escenarios se representan en colores diferentes.

cambiar la escala del eje Y. En los escenarios asociados al modo fino: Greenbelt (Figura 4.3a), el Bosque Amazónico (Figura 4.3c) y Cerrado (Figura 4.3d), la concentración de partículas en columna es alta por lo que el valor máximo del Eje Y se fija en 0.2. Sin embargo, en los escenarios asociados al modo grueso, Paris (Figura 4.3b), Arabia Saudí (Figura 4.3e) y el Golfo Pérsico (Figura 4.3f), la concentración de partículas en columna es mucho menor por lo que para poder realizar un buen estudio será necesario fijar el máximo del eje en 0,05.

La Figura 4.3 vuelven a mostrar el comportamiento esperado; las distribuciones de tamaños iniciales y las recuperadas son completamente coincidentes.

4.3. Introducción de ruido.

Hasta ahora se había trabajado con los parámetros atmosféricos pertenecientes a los escenarios ideales de [Dubovik et al., 2002], no obstante a continuación añadiremos ruido para dotar de mayor veracidad a los datos. La distribución del ruido se supone gaussiana tanto para la radiancia como para el TOD. Aunque para cada una de las medidas se calcula de forma sutilmente distinta.

Una vez definidos los ruidos para cada tipo de medida, se realizarán 50 simulaciones de ruido

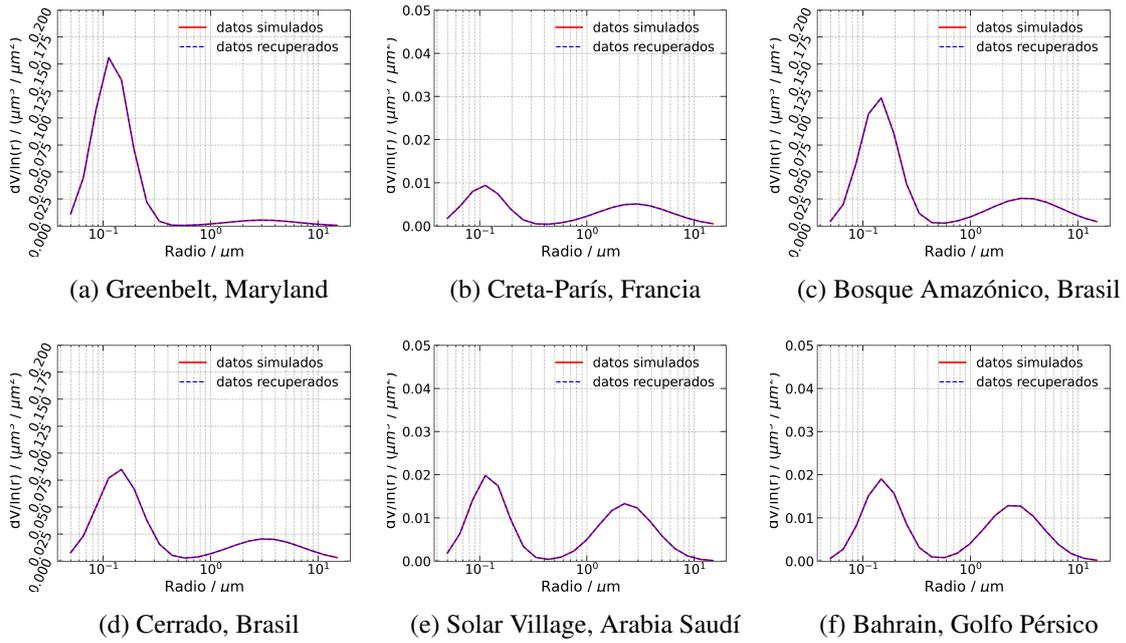


Figura 4.3: Concentración de volumen por unidad de columna en función del radio de las partículas. Cada gráfica representa un escenario. La línea roja continua representa los datos sintéticos de referencia mientras que la línea discontinua azul representa los datos recuperados.

por escenario, tomando para cada valor del TOD o de la radiancia un valor aleatorio del ruido asociado. En la Figura 4.4 se observan los 50 escenarios simulados para el escenario de Greenbelt, Maryland.

El TOD (Figura 4.4a) debido a que tiene un recorrido tan grande, toma valores entre el 0 y el 7, queda casi perfectamente superpuesto, por lo que es necesario ampliar la gráfica para apreciar la superposición de las medidas, esto es lo que se muestra en la Figura 4.4b.

Por su parte, las Figuras 4.4c y 4.4d representan el conjunto de escenarios simulando la radiancia en Greenbelt a 440 nm y 1020 nm respectivamente.

Cada una de las realizaciones de adición de ruido serán sobrescritas sobre un archivo SDATA y almacenadas por escenario, a partir de este momento, estos son los archivos con los que se trabajará.

4.4. Inversión con ruido

A continuación se repetirá el procedimiento realizado en la *Sección 4.2.* empleando el módulo de inversión numérica para los nuevos archivos SDATA con medidas ruidosas. Como se explicaba en el Capítulo 3, el algoritmo de GRASP, irá ajustando las inversiones hasta que se cumpla uno o dos de los requisitos impuestos: que el residuo entre la recuperación y la medida inicial sea menor que un valor umbral determinado o que se alcancen el número máximo de interacciones, que en este caso se ha fijado en 15.

Hay ocasiones en las que el algoritmo no logrará converger, o simplemente llega a una solución no valida. Por esto es esencial hacer un estudio de las soluciones obtenidas así como un filtrado de

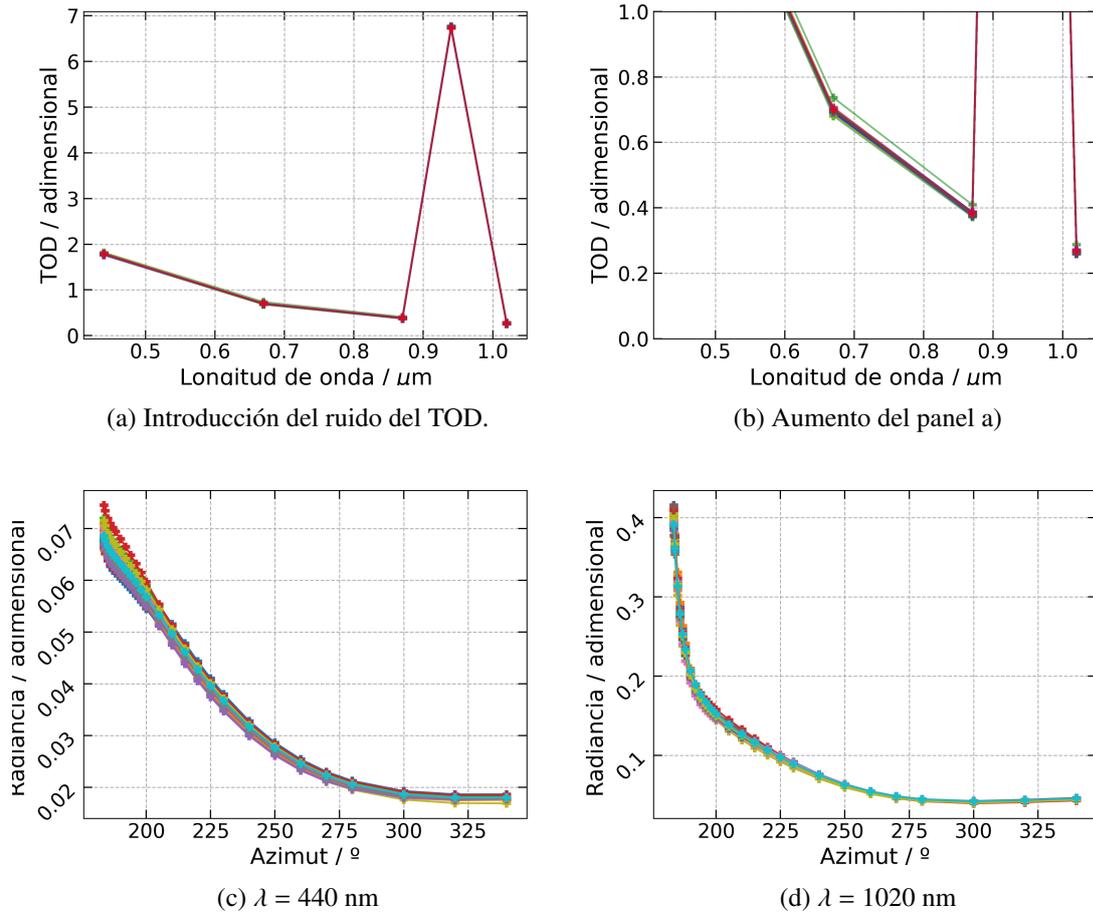


Figura 4.4: Superposición de ruido para el TOD y la radiancia del cielo a 440 nm y 1020 nm respectivamente en Greenbelt, Maryland. Cada uno de los ruidos está representado en un color.

las inversiones.

En primer lugar se realiza el filtrado de las inversiones eligiendo únicamente aquellas que converjan para hacer una interpretación física de los resultados. Las condiciones de filtrado que se han impuesto son; para la radiancia un residuo relativo menor o igual a 6.0 % y para el TOD un residuo absoluto menor o igual a 0.03.

Con estos parámetros y las condiciones iniciales empleadas para los archivos de salida *OUTPUTS* analizados a continuación, se han obtenido:

- Para Greenbelt, Maryland: 47 / 50 archivos válidos.
- Para Creta Paris, Francia: 50 / 50 archivos válidos.
- Para el Bosque Amazónico, Brasil: 49 / 50 archivos válidos.
- Para Cerrado, Brasil: 30 / 50 archivos válidos.
- Para Bahrain, Golfo Pérsico: 50 / 50 archivos válidos.
- Para Solar Village, Arabia Saudí: 50 / 50 archivos válidos.

Como se puede observar, exceptuando Cerrado, en Brasil, del cual son válidos únicamente el 60 % de los archivos, para el resto de escenarios la mayor parte de las inversiones han sido válidas. Por lo tanto es posible decir que se han obtenido unas buenas condiciones iniciales unificadas que sean válidas para todos los escenarios y tipos de aerosoles. Esto permitiría en principio realizar el mismo procedimiento con más escenarios incluso con medidas reales, aunque no se ha probado en la extensión de este trabajo.

A continuación se realiza el estudio físico de los outputs, en este caso, debido a la introducción de ruido, es de esperar que las medidas atmosféricas invertidas tanto de la radiancia como del TOD tengan un error con respecto a las proporcionados en el input, a diferencia de los obtenidos en la Sección 4.2. Esto resultará en parámetros de los aerosoles ligeramente diferentes. a continuación se realizará el estudio de las distintas propiedades para comprobar si el método de inversión es válido.

4.4.1. Diferencias relativas entre la radiancia del cielo obtenida y la original.

En primer lugar, se realizará un estudio análogo al explicado tras la inversión sin ruido. La Figura 4.5 muestra la diferencia relativa en porcentaje entre la media de la radiancia del cielo recuperada y la radiancia original para todos los escenarios separados por longitudes de onda. Es de esperar que a diferencia de la Figura 4.2, estas inversiones muestren un error que aunque pequeño, sea no nulo.

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos tras filtrar las inversiones de acuerdo a su ruido, París, el Golfo Pérsico y Arabia Saudí obtienen las diferencias mínimas, mientras que Cerrado muestra las diferencias máximas entre los valores de radiancia recuperada y la radiancia original para las cuatro longitudes de onda.

Puesto que las gaussianas de ruido empleadas consideran un error del 5 % en las medidas, todos los resultados de la inversión deberán de tener una diferencia promedio menor o igual del 6 % respecto de las medidas simuladas, como fija el criterio de convergencia. Además, siempre que el error relativo entre las radiancias sea menor al 5 %, los resultados se pueden considerar que están dentro del rango de incertidumbre del CIMEL. Esto se cumple en todos los escenarios y longitudes de onda exceptuando en Cerrado a $\lambda = 440$ nm. Tiene sentido puesto que, como se ha mencionado, es el escenario en el que se encuentra menor convergencia.

Debido a que el error se encuentra en el marco permitido, es decir, en el interior de la gaussiana de errores establecida, podemos concluir que numéricamente nuestras medidas son válidas; para realizar un estudio en mayor profundidad se analizarán a continuación más propiedades de los aerosoles.

4.4.2. Distribución de tamaños de los aerosoles

Para analizar las distribuciones de tamaños es necesario recordar que los aerosoles estudiados de origen urbano-industrial y de quema de biomasa son del modo fino mientras que los aerosoles desérticos, de polvo mineral, son del modo grueso.

La Figura 4.6 muestra la distribución de tamaños simulada y la media de la distribución de

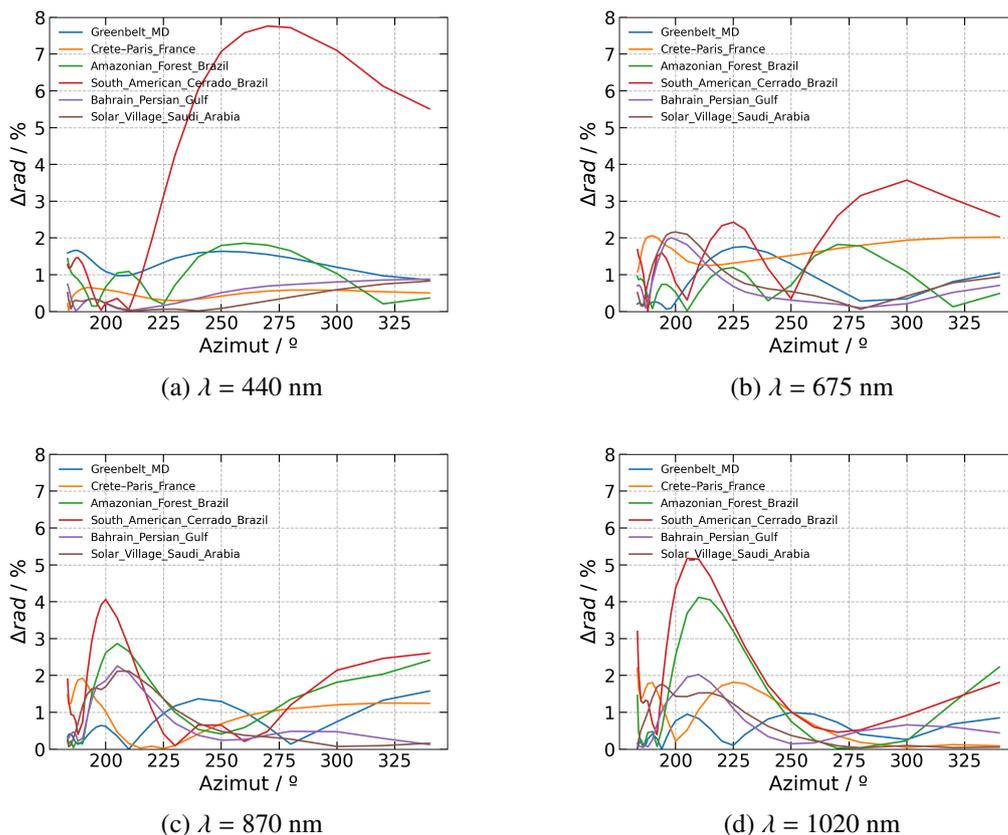


Figura 4.5: variación de radiancia entre las medidas simuladas y el valor medio de los 50 parámetros obtenidos tras la introducción de un ruido. Se define $\Delta rad = |(I_{obtenida} - I_{simulada}) / (I_{simulada})| \cdot 100$. Cada una de las subfiguras muestran Δrad para una de las longitudes de onda perteneciente a los canales asociados a los aerosoles. Los escenarios se representan en colores diferentes.

tamaños recuperada para los seis escenarios estudiados. La zona sombreada en gris representa los datos recuperados pertenecientes al rango intercuartílico ($RIC = q_3 - q_1$). Las barras azules hacen referencia a los datos comprendidos entre los deciles uno y nueve.

Los tres escenarios que muestran con más claridad el comportamiento de la distribución de tamaños son también los tres que más TOD tienen, seguidos de Paris. Como los valores de AOD en los escenarios desérticos es más bajo que en otros escenarios el pico del modo grueso tendrá un tamaño comparable al del modo fino, en vez de notablemente mayor, como se observa en los escenarios con un modo fino predominante.

Las subfiguras correspondientes a Greenbelt (Figura 4.6a), Bosque Amazónico (Figura 4.6c) y Cerrado (Figura 4.6d) muestran claramente un comportamiento de modo fino con un claro pico predominante centrado cerca de $10^{-1} \mu m$ tanto para los parámetros simulados como para los parámetros invertidos.

Prestando atención a este pico, es sencillo distinguir los parámetros simulados y los obtenidos puesto que no se superponen. La línea azul, que representa los parámetros obtenidos, en todos los casos muestra parcialmente una diferencia respecto de las medidas simuladas que excede el rango determinado por los datos pertenecientes al RIC. A pesar de conseguir reproducir el comportamiento de la distribución de tamaños, el valor de la concentración en volumen de partículas dista

más de lo que se consideraría óptimo.

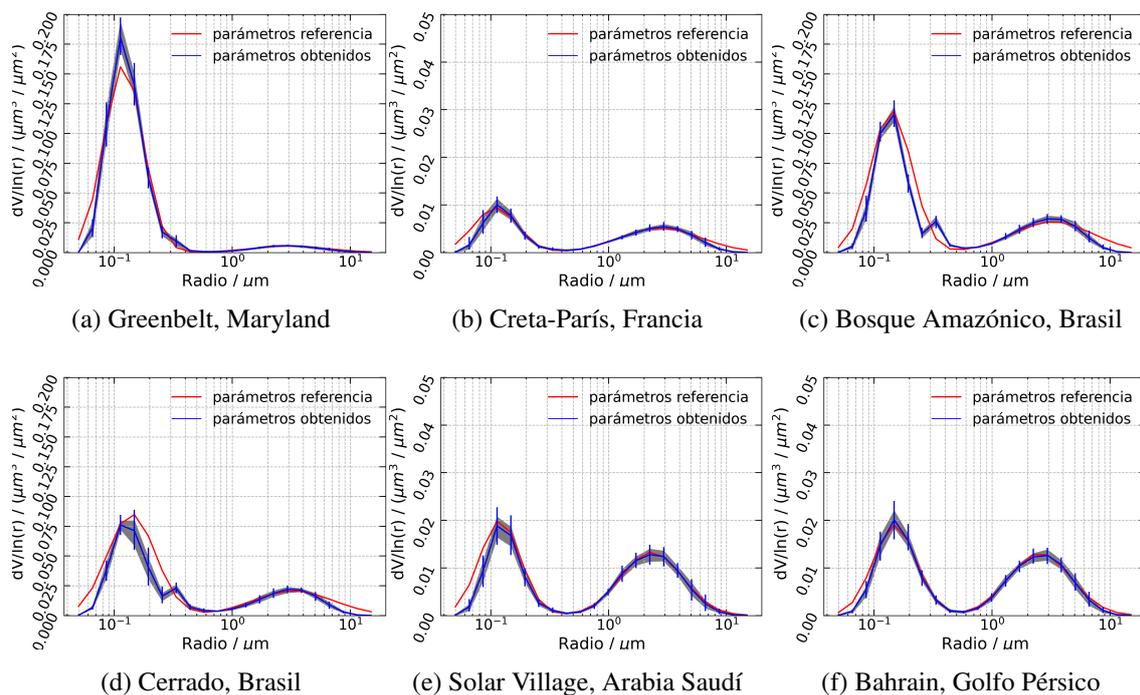


Figura 4.6: Distribución de tamaños para los seis escenarios estudiados. En rojo se muestran las distribuciones de tamaños iniciales, en azul la media de las distribuciones de tamaños recuperadas, la zona sombreada gris representa los datos recuperados pertenecientes al rango intercuartílico (RIC) es decir a los datos entre el primer y tercer cuartil y finalmente las barras verticales azules comprenden los puntos entre el primer y el noveno decil.

Por su parte las figuras correspondientes a Arabia Saudí (Figura 4.6e), al Golfo Pérsico (Figura 4.6f) y Creta-París (Figura 4.6b) muestran un comportamiento del modo coarse; se puede apreciar el pico correspondiente a la distribución perteneciente al modo grueso y centrado en 2 - 3 μm de radio. A diferencia de los resultados observados para el modo fino, en los escenarios con aerosoles pertenecientes mayoritariamente al modo grueso, las distribuciones de tamaños de referencia se encuentran en el rango de incertidumbre esperado para estos bins. Se ha conseguido invertir con éxito el comportamiento y los valores de la concentración en volumen de los aerosoles en estos casos.

Nuevamente, en la Figura 4.6, ha sido necesario cambiar la escala del Eje Y. Para los escenarios de Greenbelt (Figura 4.3a), del Bosque Amazónico (Figura 4.3c) y de Cerrado (Figura 4.3d) la concentración de partículas en columna es alta por lo que el valor máximo del Eje Y se fija en 0.2. Por su parte en los escenarios de Paris (Figura 4.3b), de Arabia Saudí (Figura 4.3e) y del Golfo Pérsico (Figura 4.3f) la concentración de partículas en columna es mucho menor por lo que para poder realizar un buen estudio será necesario fijar el máximo del eje está fijado en 0.05.

4.4.3. Albedo de dispersión simple

Los aerosoles atmosféricos juegan un papel crucial en la interacción de la luz solar con la atmósfera terrestre. El albedo de dispersión simple da cuenta de esta interacción como explica la

Ecuación 1.10; cuanto mayor sea la radiación absorbida, menor será el valor del albedo.

Las características físicas de una partícula como el tamaño, la forma y la composición determinan en gran medida como se dispersa o absorbe la radiación electromagnética incidente.

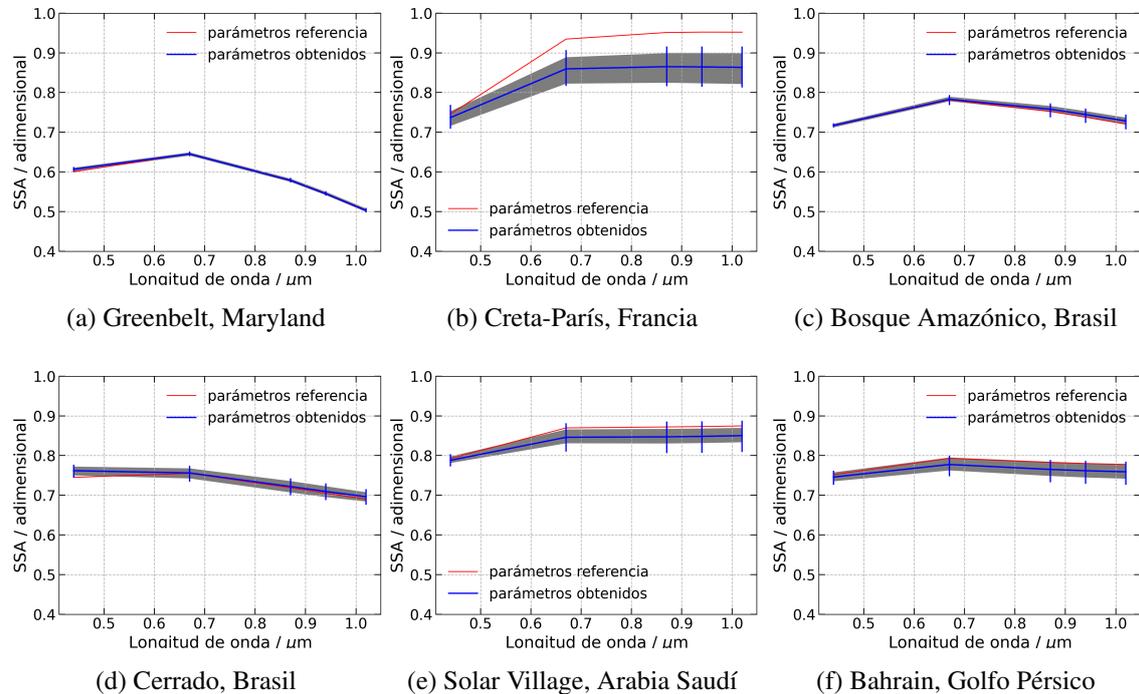


Figura 4.7: Albedo de dispersión simple (SSA) para los seis escenarios estudiados. En rojo se muestran los albedos de dispersión simple iniciales, en azul la media de los albedos de dispersión simple recuperados, la zona sombreada gris representa los datos recuperados pertenecientes al rango intercuartílico (RIC) es decir a los datos entre el primer y tercer cuadrante y finalmente las barras verticales azules comprenden los puntros entre el primer y el noveno decil.

El albedo de dispersión simple, está fuertemente relacionado con la composición química de los aerosoles atmosféricos. Entre los escenarios estudiados: el aerosol urbano-industrial es predominantemente *black carbon*, el aerosol de quema de biomasa es predominantemente *brown carbon* y el aerosol desértico está compuesto de polvos minerales.

Tanto *black carbon* como el *brown carbon*, están caracterizados por ser componentes químicas con una predisposición de absorción de la radiación solar. Al absorber una mayor cantidad de la radiación, el albedo de dispersión simple tomará los valores más bajos. Generalmente el *black carbon* es más absorbente que el *brown carbon* [Aernova, 2019].

Por su parte, el polvo mineral tiene menos capacidad de absorción, de forma que la interacción esperada entre estas partículas y la radiación solar viene dada principalmente por los fenómenos de dispersión. Esto da lugar a un albedo de dispersión simple alto [Mariela, 2023].

En la Figura 4.7 se pueden observar los SSA para cada uno de los escenarios estudiados. Como se acaba de mencionar, el comportamiento de las gráficas asociadas a los aerosoles del modo fino y compuestos de carbon en Greenbelt (Figura 4.7a), en el Bosque Amazónico (Figura 4.7c) y en Cerrado (Figura 4.7d) tienen un máximo en los dos primeros canales de medida, los correspondientes a las longitudes de onda más cortas. El albedo siempre es inferior a 0.8 y toma

valores mínimos próximos a 0.5.

Se puede observar que la Figura 4.3a, asociada a Greenbelt es la que tiene un SSA menor. Esto tiene sentido, puesto que como se ha mencionado antes, el *black carbon* es la especie química más absorbente y la principal componente de los aerosoles urbano-industriales que predominan en este Greenbelt.

Por su parte, los escenarios con aerosoles desérticos; Arabia Saudí (Figura 4.7e) y Bahrain (Figura 4.7f) muestran albedos de dispersión con valores entre 0.7 y 0.9. Los resultados obtenidos concuerdan con la teoría puesto que el principal componente de los aerosoles de estos escenarios es el polvo mineral, que dispersa la mayoría de la luz.

Finalmente se puede observar que los valores del SSA originales se encuentran en el rango de incertidumbre esperado del SSA obtenido.

El SSA obtenido encaja con el original exitosamente a excepción de París (Figura 4.7b). En este escenario también se muestra que el albedo inicial se encuentra fuera del rango de incertidumbre esperado para el albedo obtenido.

4.5. Vapor de agua simulado y el recuperado

El objetivo principal de este trabajo era lograr invertir el vapor de agua a la vez que los aerosoles. El estudio realizado hasta este punto se ha centrado en las propiedades asociadas a los aerosoles, comprobando que las simulaciones se han podido invertir con éxito. Para finalizar, se valorará la efectividad del método para la inversión de vapor de agua, comparando el vapor de agua obtenido con el vapor de agua simulado para cada escenario.

El panel superior de la Figura 4.8 muestra la correlación entre los distintos escenarios ruidosos, presentados en el eje Y y el vapor de agua simulado en cada escenario. La correlación nos permite demostrar si los parámetros recuperados y simulados tienen relación y en caso de tenerla, cómo de buena es. En este caso es posible observar que la relación entre las concentraciones de vapor de agua en columna es muy buena; se obtiene un coeficiente de correlación R igual a 1 para 300 concentraciones.

El panel inferior de la Figura 4.8 muestra un histograma que representa la distribución de probabilidad de los vapores de agua obtenidos menos los simulados. La distribución que se muestra tiene una forma gaussiana, al igual que los errores que se han asumido por lo que las hipótesis asumidas son correctas.

La diferencia media de los parámetros es de -300.67 DU. Teniendo en cuenta que la concentración del vapor de agua total es del orden de un millón, se muestra así que no hay bias.

La desviación estándar toma un valor de 3077.73 DU, que supone una incertidumbre del 0.103 %.

Teniendo en cuenta que tanto la correlación del vapor de agua y la función de probabilidad de las diferencias como las propiedades estudiadas de los aerosoles son muy buenas, podemos concluir con que el método de inversión propuesto funciona adecuadamente.

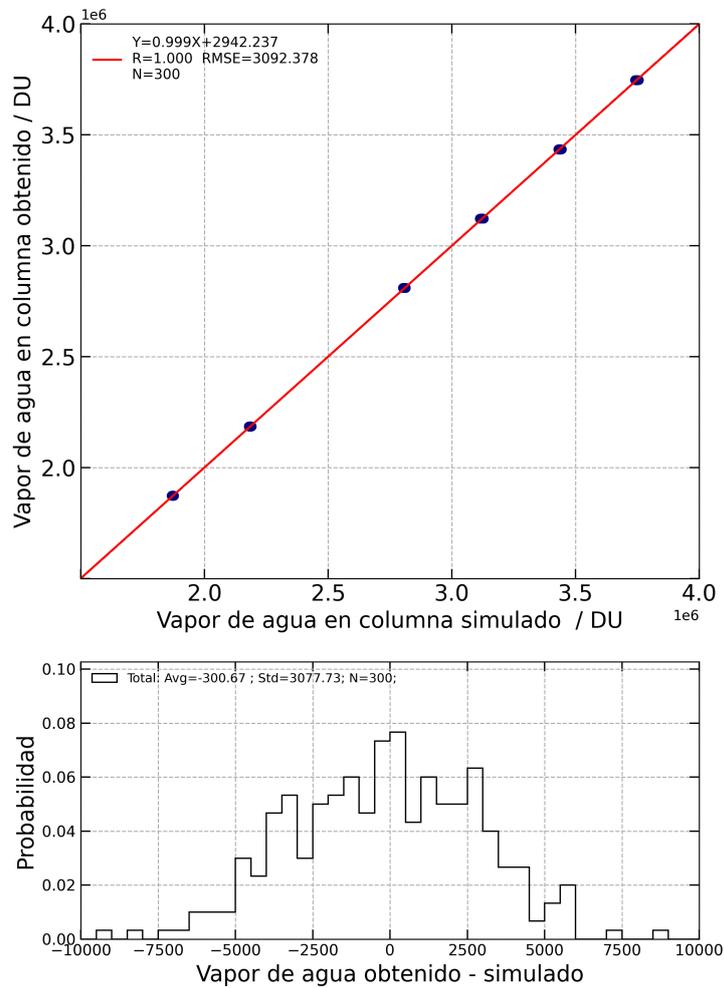


Figura 4.8: Panel superior: correlación entre el vapor de agua recuperado en cada escenario y el vapor de agua simulado empleando el Módulo Forward de GRASP. Cada uno de los grupos puntos azules representan el vapor de agua en columna para cada uno de los escenarios; en el eje Y se representa el vapor de agua para las 50 atmósferas obtenidas para cada escenario y en el eje X se representa el vapor de agua que se ha proporcionado a la hora de realizar la simulación. Los escenarios tienen diferentes concentraciones de vapor de agua en columna y el orden de menor a mayor concentración es: Golfo Pérsico, Arabia Saudí, Paris, Greenbelt, Cerrado y el Bosque Amazónico. Panel inferior: histograma que representa la distribución de probabilidad de las concentraciones de vapor de agua obtenidas menos las simuladas.

5. CONCLUSIONES

El cambio climático es un gran problema a día de hoy por lo que es importante un estudio extensivo de todos los agentes que lo caracterizan. El vapor de agua es uno de los principales gases de efecto invernadero. En cambio el efecto de los aerosoles en el clima a día de hoy es aún incierto.

El objetivo de este trabajo es conseguir hallar las propiedades del vapor de agua y los aerosoles atmosféricos simultáneamente. Para ello se emplea el algoritmo de GRASP. La principal ventaja de recuperar ambas propiedades en el mismo proceso es que al realizar una inversión para caracterizar ambos agentes climáticos, solo habrá unas condiciones iniciales y unas restricciones; al ser un proceso más corto, se minimizan los errores.

Se ha empleado el algoritmo GRASP, a fin de caracterizar la atmósfera en seis escenarios para tres tipos de aerosoles diferentes; quema de biomasa, urbano-industriales y aerosol desértico.

Para realizar un estudio adecuado de los agentes que caracterizan el cambio climático en primer lugar, empleando el código GRASP se han simulado seis escenarios de tipo de quema de biomasa, aerosol urbano-industrial o desértico con distintas concentraciones de vapor de agua.

A continuación, empleando el módulo *forward* de GRASP, se han simulado las medidas del TOD y la radiancia que tomaría un fotómetro CIMEL CE318. A continuación, haciendo uso del módulo de inversión, se han recuperado los escenarios iniciales mostrando que en una situación ideal los resultados de la inversión serán idénticos a los parámetros atmosféricos introducidos.

Para replicar una situación real, se ha realizado una introducción de ruido para las medidas atmosféricas (TOD y radiancia del cielo) simuladas y nuevamente se han invertido estas medidas para comparar los parámetros atmosféricos iniciales con los recuperados.

Puesto que las inversiones finales no se realizan en condiciones ideales, es de esperar que los parámetros atmosféricos obtenidos no coincidan completamente con los simulados. Además, antes de analizar los resultados, se realiza un filtrado de escenarios por sus residuos. Todos los casos han llegado a una mayoría de inversiones que convergen excepto Cerrado (Brasil) donde solo convergen el 60 %.

En primer lugar se han comparado las radiancias del cielo. Como era de esperar, las medidas simuladas y las invertidas no coinciden exactamente, no obstante, la diferencia siempre se encuentra por debajo del marco establecido, que se ha fijado en 6 %.

A continuación se han analizado las distribuciones de tamaños. En general se muestra que para los aerosoles pertenecientes para el modo fino se ha logrado reproducir el comportamiento de las distribuciones de tamaños. No obstante para la concentración en volumen para las partículas de radio del orden de $10^{-1}\mu m$ los valores obtenidos no se adecúan a los valores de referencia. La diferencia entre la distribución de referencia y la distribución obtenida excede el rango óptimo. Por su parte, para los escenarios caracterizados por los aerosoles del modo grueso, se ha logrado reproducir tanto el comportamiento como los valores de la concentración en volumen de los aerosoles atmosféricos. La inversión para estos escenarios ha sido un éxito.

El albedo de dispersión simple da cuenta de la absorción de la radiación solar debida a los

aerosoles. Los aerosoles urbano-industriales o de quema de biomasa están compuestos principalmente por *black carbon* y *brown carbon*. Por tanto serán partículas muy absorbentes y mostrarán un SSA bajo (0,5-0,8). En cambio el aerosol desértico, compuesto principalmente por polvos minerales, será un gran dispersor de la radiación solar y mostrará un SSA alto (0,7-0,9). Los datos experimentales concuerdan con los teóricos.

En general todos los escenarios muestran un buen acuerdo con el comportamiento teórico que han de exhibir los aerosoles en cada caso, a excepción de Creta-París, Francia. En la distribución de tamaños no se muestra un pico predominante del modo fino. Por su parte el albedo de dispersión simple muestra valores muy próximos al 1. Valores tan altos del albedo dan a entender que la absorción de la radiación por parte de las partículas es mínima.

Finalmente se ha realizado una correlación del vapor de agua en columna obtenido en cada escenario respecto del vapor de agua en columna sintético obteniéndose muy buena relación con un coeficiente de correlación R igual a 1. Además en el histograma de frecuencias se muestra que la desviación estándar es de 3077.73 DU; teniendo en cuenta que la concentración de vapor de agua en columna es del orden de $3E6$ DU, esto supone una incertidumbre de un 0.103 %.

Podemos concluir que debido al buen acuerdo entre los parámetros recuperados y los simulados, tanto para los aerosoles como para el vapor de agua, el método expuesto es una forma de inversión fiable y efectiva.

BIBLIOGRAFÍA

- [Aernova, 2019] Aernova, T. (2019). Biomasa: respetuosa con el medio ambiente pero potencialmente peligrosa para la salud. <https://www.tamaaernova.com/es/blog/detail/biomass-environmentally-friendly-but-potential-health-hazard.html>. Accedido: 22 de junio de 2023.
- [Baron and Willeke, 2001] Baron, P. and Willeke, K. (2001). Aerosol measurement principles, techniques and applications. *John Wiley Sons, INC., New York*.
- [Bohren and Hufmann, 1983] Bohren and Hufmann (1983). *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*.
- [Dubovik et al., 2021] Dubovik, O., Fuertes, D., Litvinov, P., Lopatin, A., Lapyonok, T., Dubovik, I., Xu, F., Ducos, F., Chen, C., Torres, B., Derimian, Y., Li, L., Herreras-Giralda, M., Herrera, M., Karol, Y., Matar, C., Schuster, G., Espinosa, R., Puthukkudy, A., and Federspiel, C. (2021). A comprehensive description of multi-term lsm for applying multiple a priori constraints in problems of atmospheric remote sensing: Grasp algorithm, concept, and applications. *Frontiers in Remote Sensing*, 2:706851.
- [Dubovik et al., 2002] Dubovik, O., Holben, B., Eck, T., Smirnov, A., Kaufman, Y., King, M., Tanré, D., and Slutsker, I. (2002). Variability of absorption and optical properties of key aerosol types observed in worldwide locations. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 59:590–608.
- [Espinosa et al., 2017] Espinosa, W. R., Remer, L. A., Dubovik, O., Ziemba, L., Beyersdorf, A., Orozco, D., Schuster, G., Lapyonok, T., Fuertes, D., and Martins, J. V. (2017). Retrievals of aerosol optical and microphysical properties from imaging polar nephelometer scattering measurements. *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(3):811–824.
- [González Catón et al., 2021] González Catón, R. et al. (2021). Desarrollo de nuevos métodos de procesado de datos de redes fotométricas para el análisis de propiedades del aerosol atmosférico.
- [Holben et al., 1998] Holben, B., Eck, T., Slutsker, I., Tanré, D., Buis, J., Setzer, A., Vermote, E., Reagan, J., Kaufman, Y., Nakajima, T., Lavenue, F., Jankowiak, I., and Smirnov, A. (1998). Aeronet—a federated instrument network and data archive for aerosol characterization. *Remote Sensing of Environment*, 66(1):1–16.
- [J.Antuña, 2022] J.Antuña (2022). *Configuración y metodología para el uso de cámaras de todo cielo en la obtención de parámetros atmosféricos*. PhD thesis.
- [Liou, 2002] Liou (2002). *An introduction to atmospheric radiation*. Academic Press, 2nd edition.
- [Mariela, 2023] Mariela, L. (2023). Polvo de tormentas del desierto oculta el calentamiento global.

- [Mishchenko et al., 1997] Mishchenko, M. I., Travis, L. D., Kahn, R. A., and West, R. A. (1997). Modeling phase functions for dustlike tropospheric aerosols using a shape mixture of randomly oriented polydisperse spheroids. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 102(D14):16831–16847.
- [Pérez-Ramírez et al., 2014] Pérez-Ramírez, D., Whiteman, D. N., Smirnov, A., Lyamani, H., Holben, B. N., Pinker, R., Andrade, M., and Alados-Arboledas, L. (2014). Evaluation of aeronet precipitable water vapor versus microwave radiometry, gps, and radiosondes at arm sites. *Journal of geophysical research. Atmospheres*, 119(15):9596–9613.
- [Román et al., 2018] Román, R., Benavent-Oltra, J., Casquero-Vera, J., Lopatin, A., Cazorla, A., Lyamani, H., Denjean, C., Fuertes, D., Pérez-Ramírez, D., Torres, B., Toledano, C., Dubovik, O., Cachorro, V., de Frutos, A., Olmo, F., and Alados-Arboledas, L. (2018). Retrieval of aerosol profiles combining sunphotometer and ceilometer measurements in grasp code. *Atmospheric Research*, 204:161–177.
- [Szopa and Zanis, 2021] Szopa, S., V. N. B. A. A. P. B. T. C. W. F. S. G. L. S. A. K. K. Z. L. H. U. N. and Zanis, P. (2021). Short-lived climate forcers. in climate change 2021: The physical science basis. contribution of working group i to the sixth assessment report of the intergovernmental panel on climate change. *Cambridge University Press*.
- [Toledano Olmeda et al., 2005] Toledano Olmeda, C. et al. (2005). Climatología de los aerosoles mediante la caracterización de propiedades ópticas y masas de aire en la estación ‘el arenosillo’ de la red aerone.