



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

Evaluación de las diferentes metodologías para Inferir el espesor óptico de aerosoles a distintas longitudes de onda a partir de otros datos espectrales

Autor: Manuel Veloso Varela

Tutores: Dr. David Mateos, Dr. David Fuertes

2024

*La cuestión, no es si amarás, sufrirás,
soñarás y morirás. Es qué amarás, por
qué sufrirás, cuándo soñarás y cómo
morirás. Esas son tus elecciones. No
puedes elegir el destino, sólo el
camino.*

Brandon Sanderson (2017) Juramentada

Índice

1. Introducción	6
1.1. Aerosoles: Definición, tipos y propiedades	6
1.1.1. Definición	6
1.1.2. Clasificación de aerosoles en función de su origen	6
1.1.3. Propiedades microfísicas y ópticas de los aerosoles	7
1.1.4. Modelos de aerosoles	8
1.1.5. Espesor óptico de aerosoles - AOD	9
1.2. Instrumentación: Radiómetro CIMEL y red de AERONET	11
1.2.1. La red AERONET	11
1.2.2. Climatología global de aerosoles.	12
1.2.3. CIMEL	14
2. Objetivos	15
3. Metodología	15
3.1. Tratamiento de datos	15
3.2. Exponente de Ångström	16
3.3. Regresión lineal Log-Log	17
3.3.1. Caso ideal 1º	18
3.3.2. Caso ideal 2º	18
3.4. Regresión cuadrática Log-Log	20
3.5. GRASP-AOD	21
4. Resultados: Interpolación - AOD 550nm	22
4.1. Resultados previos a corrección de error	22
4.2. Resultados finales	23

5. Conclusiones	26
6. Referencias	27

Abstract

Traditional satellite sensors routinely provide aerosol optical thickness as a standard product at 550 nm, a spectral band shared among these sensors. Despite the ubiquity of this measurement, the ground-based AERONET network, which manages more than 1000 stations and is widely recognised for satellite data validation, lacks data at this wavelength within its spectral dataset (340-1640 nm). AERONET calculates the spectral optical thickness of aerosols with exceptional accuracy, using solar irradiance and the Beer-Lambert law. However, the absence of the 550 nm value in AERONET poses an additional challenge for the validation of satellite products. Several methods proposed in the scientific literature address this issue, such as logarithmic linear interpolation (using the so-called Ångström parameter,), and logarithmic quadratic interpolation, among others.

This study explores the effectiveness of various regression methods in predicting aerosol optical thickness (AOD) values for specific wavelengths (550 nm), with the best method being the Log-Log Quadratic when considering all wavelengths, across multiple aerosol models with different concentrations.

Resumen

Los sensores satelitales tradicionales proporcionan de forma rutinaria el espesor óptico de aerosoles como producto estándar a 550 nm, una banda espectral compartida entre estos sensores. A pesar de la ubicuidad de esta medida, la red terrestre AERONET, que gestiona más de 1000 estaciones y es ampliamente reconocida para la validación de datos de satélite, carece de datos en esta longitud de onda dentro de su conjunto de datos espectrales (340-1640 nm). AERONET calcula el espesor óptico espectral de los aerosoles con una precisión excepcional, empleando la irradiancia solar y la ley de Beer-Lambert. Sin embargo, la ausencia del valor de 550 nm en AERONET supone un reto adicional para la validación de los productos satelitales. Diversos métodos propuestos en la literatura científica abordan esta cuestión, como la interpolación lineal logarítmica (utilizando el denominado parámetro de Ångström, Ångström 1929), y la interpolación logarítmica cuadrática, entre otros.

Este estudio explora la eficacia de varios métodos de regresión en la predicción de valores del espesor óptico de aerosoles (AOD) para longitudes de onda específicas (550 nm), siendo el mejor método el Log-Log Quadratic considerando todas las longitudes de onda, a través de múltiples modelos de aerosoles con diferentes concentraciones.

1. Introducción

Los aerosoles atmosféricos, desempeñan un papel crucial en los procesos climáticos y ambientales. Estas partículas tienen una influencia significativa en la radiación solar que alcanza la superficie terrestre, afectando tanto el balance radiativo global como la calidad del aire. El espesor óptico de los aerosoles (AOD, por sus siglas en inglés) es una de las principales variables utilizadas para cuantificar la presencia de aerosoles en la atmósfera y evaluar su impacto en la radiación, midiendo su capacidad para absorber o dispersar la luz solar.

A lo largo del tiempo, la comunidad científica ha desarrollado una variedad de metodologías destinadas a inferir el AOD en diferentes longitudes de onda, con el objetivo de profundizar en el conocimiento de las propiedades ópticas de los aerosoles. La red AERONET (Aerosol Robotic Network), mediante el uso de radiómetros CIMEL, ha proporcionado una extensa base de datos global con mediciones precisas de AOD, lo que ha facilitado el estudio detallado de la climatología de los aerosoles y el desarrollo de modelos atmosféricos. Estos modelos resultan esenciales para predecir cómo los aerosoles interactúan con la radiación y con los procesos climáticos, tanto a escala local como global.

El presente estudio tiene como objetivo evaluar diversas metodologías estadísticas utilizadas para inferir el AOD en distintas longitudes de onda a partir de otros datos espectrales. Mediante un análisis comparativo, se pretende identificar cuál de los seis métodos seleccionados proporciona una mayor precisión en la estimación del AOD.

1.1. Aerosoles: Definición, tipos y propiedades

1.1.1. Definición

Un **aerosol** se define como un sistema de partículas sólidas o líquidas suspendidas en un medio gaseoso (Willeke y Baron, 1993).

El estudio de los aerosoles abarca una amplia gama de campos, incluyendo los procesos de combustión, la contaminación atmosférica, los estudios climáticos, la higiene y salud en el trabajo, la fabricación de salas limpias y los aerosoles biogénicos, entre otros. En la atmósfera, el análisis de los aerosoles incluye tanto los procesos básicos de interacción con la radiación como su impacto climático, conocido como *radiative forcing*, así como los problemas de contaminación del aire.

1.1.2. Clasificación de aerosoles en función de su origen

Según su origen, los aerosoles atmosféricos se clasifican en **naturales** y **antropogénicos**. Los aerosoles **naturales** incluyen cenizas volcánicas, sal marina, polvo desértico, polen y esporas, entre otros. Por otro lado, los aerosoles antropogénicos provienen de actividades humanas como el humo de los vehículos y las partículas de procesos industriales.

Los diversos mecanismos de generación de estas partículas incluyen procesos como la combustión, los movimientos de masas de aire que arrastran polvo desértico o partículas marinas, y las reacciones químicas entre sustancias precursoras. Los aerosoles generados por estos mecanismos se eliminan de la atmósfera

mediante la acción gravitatoria, la condensación y posterior precipitación, la coagulación, entre otros procesos.

El tiempo de vida media de estas partículas en la atmósfera varía dependiendo del proceso de eliminación, oscilando entre minutos y semanas en la troposfera, y hasta meses en casos específicos donde alcanzan la estratosfera, como ocurre con las cenizas volcánicas, ya que procesos como la precipitación o la condensación no ocurren en esa capa.

1.1.3. Propiedades microfísicas y ópticas de los aerosoles

Los parámetros principales para estudiar los aerosoles y determinar sus efectos son su forma, tamaño y composición química. Éstos parámetros son fundamentales para derivar sus propiedades ópticas mediante la teoría del *scattering*. Los tamaños pueden variar desde unas milésimas de micra hasta $100\mu m$. Los aerosoles, en función de su diametro medio, se clasifican en tres modos principales: condensación (rango desde unos nm hasta $0,1\mu m$), acumulación (entre $0,1\mu m$ y $1 - 2\mu m$) y grueso (desde 1 a $100\mu m$).

Los efectos de los aerosoles sobre la atmósfera y el clima incluyen efectos directos de atenuación de radiación, por dispersión y absorción, y efectos indirectos por su participación en la formación de nubes, influyendo así en las características radiativas de estas, como el albedo.

Los aerosoles atmosféricos se pueden medir y estudiar mediante varios métodos. Se pueden tomar muestras a lo largo de la columna atmosférica y analizarlas en el laboratorio. Otra alternativa es usar instrumentación para analizarlas in situ, tanto a nivel del suelo como a bordo de aviones. También se pueden extraer propiedades de los aerosoles a partir del efecto que la presencia de estos tiene sobre la radiación solar que atraviesa la atmósfera y llega al suelo. También se pueden caracterizar a partir de sensores instalados en satélites o aeronaves, aunque en este caso las propiedades radiativas de los aerosoles están acopladas con las de la superficie terrestre en la que se encuentran suspendidos.

El efecto de los aerosoles sobre la radiación varía para cada región espectral y está estrechamente ligado a sus propiedades ópticas y microfísicas. Por lo tanto, la medición y análisis de la radiación en la atmósfera es una de las principales metodologías para el estudio de los aerosoles. Específicamente, una partícula en la atmósfera introduce una discontinuidad en el índice de refracción respecto al aire que la rodea y dispersa luz en todas direcciones, aunque no de forma isotrópica en general, tal y como explica la teoría de dispersión de Mie (Mie, 1908;1944). En caso de que la absorción tenga un peso considerable en los procesos de extinción, este índice de refracción se vuelve complejo, siendo la parte imaginaria la que representa dicha contribución. La extinción de la radiación debida a los aerosoles es, por tanto, la suma de la dispersión y la absorción.

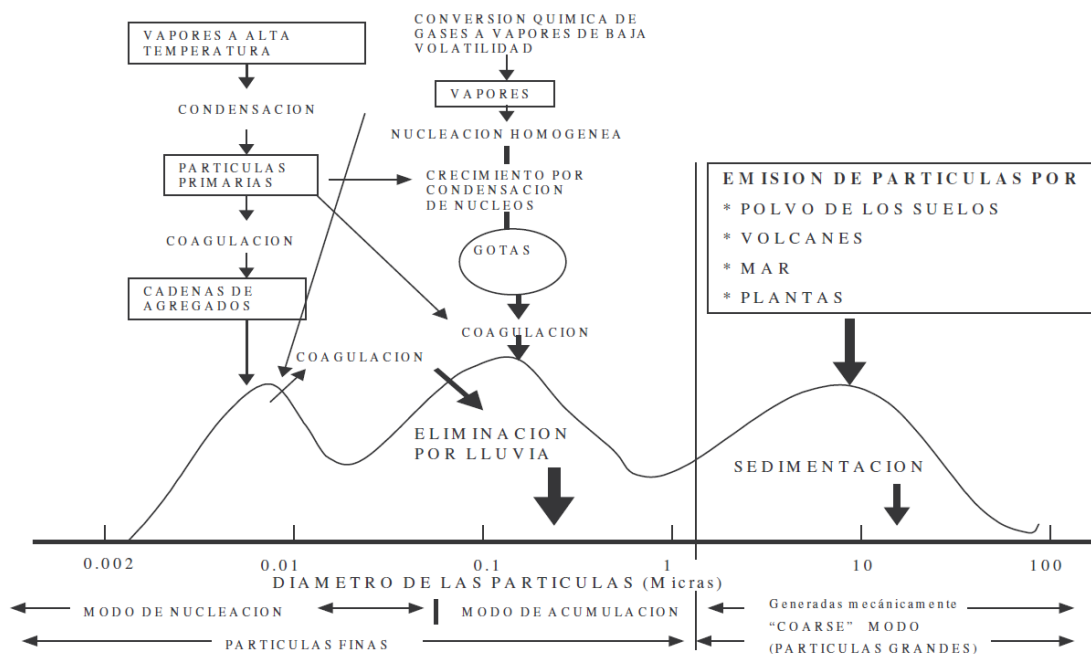


Figura 1: Forma típica de la función de distribución de tamaños de los aerosoles, con los tres modos y los mecanismos de formación y eliminación en la atmósfera (Tesis Carlos Toledano, 2005)

1.1.4. Modelos de aerosoles

Para estudiar los aerosoles atmosféricos, es necesario caracterizar sus propiedades ópticas y microfísicas, lo que permite identificar el tipo de aerosol en una zona de estudio. Las características microfísicas de los aerosoles se representan principalmente mediante la función de distribución de tamaños. En el caso de la caracterización a partir de medidas obtenidas por fotómetros terrestres, la distribución de tamaño (numérica, contando el número de partículas en función del radio, o más típicamente volúmica equivalente pero considerando el volumen) se da para toda la columna atmosférica.

Los modelos de aerosoles actuales se basan en el conocimiento acumulado sobre los diferentes tipos de aerosoles, a partir de mediciones y estudios ampliamente documentados en la literatura sobre la caracterización de aerosoles atmosféricos (Vergaz, 2001; D'Almeida, 1991; Dubovik et al., 2002). En general, se asignan a cada tipo de aerosol valores o rangos esperados para diferentes parámetros microfísicos y radiativos. Los tipos de aerosoles más descritos en la literatura serían los siguientes:

Aerosol marítimo

El aerosol marítimo está compuesto principalmente por partículas de sal marina que se generan a partir de la acción del viento sobre la superficie del océano. Estas partículas tienden a ser relativamente grandes y pueden influir en la formación de nubes marinas. Las propiedades ópticas típicas del aerosol marítimo incluyen un índice de refracción real suele estar cerca de el del agua, 1.33, debido a su fuerte higroscopicidad y el imaginario bajo ya que es poco absorbente.

Aerosol continental

El aerosol continental incluye una mezcla de partículas de polvo, polen, esporas y otras materias biológicas. Estos aerosoles pueden tener una amplia gama de tamaños y composiciones, dependiendo de la vegetación, la actividad humana y otras fuentes locales. Su impacto óptico varía considerablemente, influenciado por factores como la humedad y la presencia de contaminantes que le pueden hacer más o menos absorbentes.

Aerosol desértico

El aerosol desértico está compuesto principalmente por partículas de polvo mineral originadas en regiones áridas y semiáridas. Estas partículas pueden viajar grandes distancias y afectar la calidad del aire y la visibilidad en áreas alejadas de su fuente. Sus propiedades ópticas están caracterizadas por un alto índice de refracción real y en general una baja absorción salvo en las longitudes de onda más cortas. Los radios medios de estas partículas suelen superar la micra (modo grueso).

Aerosol producido por la combustión de biomasa

Estos aerosoles se generan a partir de la quema de materia orgánica, como madera y residuos agrícolas. Contienen una mezcla de carbono orgánico y negro, y pueden tener un impacto significativo en la radiación atmosférica y la formación de nubes. Las partículas resultantes de la combustión de biomasa suelen ser pequeñas y con una alta absorción que varía en función de la vegetación quemada (matojos, bosques, etc.)

Aerosol urbano/industrial

Los aerosoles urbanos e industriales provienen principalmente de actividades humanas, como la quema de combustibles fósiles y procesos industriales. Estos aerosoles suelen contener una mezcla de sulfatos, nitratos, carbono orgánico y negro, y otras sustancias químicas. Tienen un impacto significativo en la salud humana, ya que se encuentran en el aire que respiramos en nuestras ciudades, y también en el clima debido a su propiedad de nucleación de nubes, su higroscopicidad y los procesos de coagulación y mezcla con otros aerosoles.

Aerosol ártico

El aerosol ártico incluye partículas transportadas desde latitudes más bajas. En este sentido, sus propiedades ópticas y microfísicas dependerían de la fuente en cuestión. Estos aerosoles pueden influir en el balance de radiación en las regiones polares, típicamente muy limpias y sin aerosoles, y afectar el derretimiento del hielo.

1.1.5. Espesor óptico de aerosoles - AOD

El espesor óptico de los aerosoles, también conocido como AOD (Aerosol Optical Depth) es una medida radiativa más importante ya que da cuenta de la cantidad de luz que es absorbida o dispersada, i.e. la extinción total, por los aerosoles en la columna atmosférica (se puede definir también para una determinada capa de la atmósfera pero la referencia más común es una definición global).

Es decir, mediante medidas radiométricas se compara el espectro de la radiación solar directa en la superficie de la Tierra y el espectro solar extraterrestre. La diferencia entre ellos se debe a la atmósfera,

por atenuación debida a scattering de moléculas (scattering Rayleigh), las absorciones selectivas debidas a diferentes componentes atmosféricos como el ozono, oxígeno, vapor de agua, etc. y por ultimo la extinción de los aerosoles que vendría dada por la teoría de Mie si se consideran partículas esféricas (Mie, 1944) o teorías más complejas en función de las asunciones en la forma de las partículas (típicamente esferoides)

La ecuación fundamental para calcular el AOD parte de la ley de Beer-Bouguer-Lambert (Cachorro et al., 1997; Shaw, 1976) que considera la extinción total en la atmosfera (gases y aerosol) y tiene la siguiente forma:

$$V(\lambda) = V_0 \cdot R^{-2} \cdot e^{-\tau(\lambda) \cdot m} \quad (1)$$

Siendo R la distancia Tierra-Sol medida en unidades astronómicas (UA); m es la masa óptica, la cuál se relaciona con el camino óptico recorrido por la radiación medida (Kasten and Young, 1989); τ es el Espesor Óptico Total (TOD del inglés Total Optical Depth) para una longitud de onda λ concreta; y V y V_0 son, respectivamente, la señal de la irradiancia directa medida por el radiómetro y la de la irradiancia extraterrestre (la radiación solar que llega a lo más alto de la atmósfera terrestre para 1 UA) ambas de longitud de onda λ . Por lo que esta ecuación es dependiente de la longitud de onda.

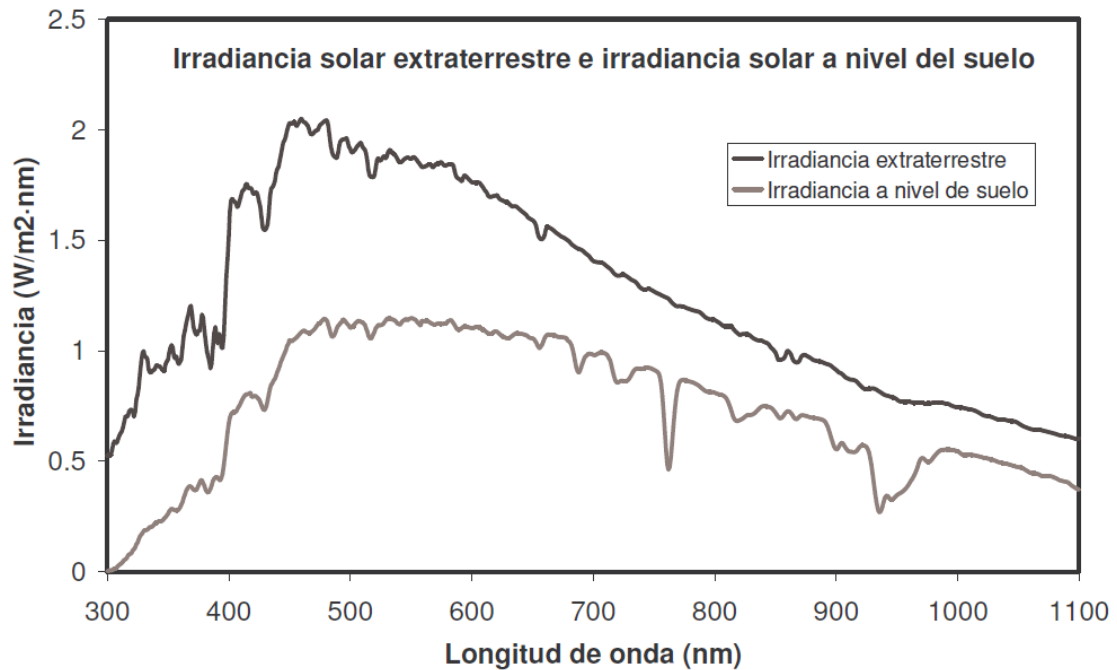


Figura 2: Irradiancia solar extraterrestre y al nivel del suelo (Tesis Carlos Toledano 2005)

Una vez se ha calculado el TOD se puede separar en cada uno de sus componentes:

$$\tau(\lambda) = \tau_a(\lambda) + \tau_R(\lambda) + \tau_g(\lambda) \quad (2)$$

donde $\tau_a(\lambda)$ (o AOD) es la contribución que hacen los aerosoles atmosféricos al TOD y $\tau_R(\lambda)$ y $\tau_g(\lambda)$ es la contribución que hacen los gases al TOD a través de los mecanismos de scattering de Raleigh ($\tau_R(\lambda)$) y de absorción ($\tau_g(\lambda)$).

La ecuación 1 presenta una misma masa óptica para todos los componentes. Esta aproximación es válida si se considera una atmósfera plano paralela. Para valores altos del ángulo solar cenital (ángulo desde el zenit hasta la posición del sol durante la medida del fotómetro), esta aproximación no es válida y hay que considerar una masa óptica diferente para cada componente que depende de la distribución del mismo en la columna atmosférica (diferentes alturas):

$$V(\lambda) = V_0 \cdot R^{-2} \cdot e^{-(\tau_a(\lambda) \cdot m_a + \tau_R(\lambda) \cdot m_R + \tau_g(\lambda) \cdot m_g)} \quad (3)$$

Despejando de esta ecuación el AOD:

$$\tau_a(\lambda) = -\frac{1}{m_a} \cdot \left[\ln \left(\frac{V(\lambda)}{V_0(\lambda) \cdot R^{2-}} \right) - \tau_R(\lambda) \cdot m_R - \tau_g(\lambda) \cdot m_g \right] \quad (4)$$

1.2. Instrumentación: Radiómetro CIMEL y red de AERONET

1.2.1. La red AERONET

AERONET (*Aerosol Robotic Network*) es una federación de redes (AERONET norteamericana, PHOTONS de Francia y Aerocan de Canadá) de radiómetros diseñados para medir aerosoles, con el objetivo de estudiar sus propiedades ópticas y validar las medidas satelitales relacionadas con los aerosoles. La red está gestionada por el Goddard Space Flight Center (GSFC) de la NASA (National Aeronautics and Space Administration) y el Laboratorio de Óptica Atmosférica (LOA) de la Universidad de Lille. Estos objetivos requieren el establecimiento de un estándar para los instrumentos, la calibración y el tratamiento de los datos.

La red se creó en 1994 y actualmente cuenta con más de 1000 estaciones distribuidas por todo el planeta. La base de datos proporciona información sobre el espesor óptico de aerosoles, vapor de agua y diversos parámetros bajo diferentes condiciones y regímenes de aerosoles.



Figura 3: Red de estaciones de AERONET alrededor del mundo

Los datos de espesor óptico de aerosoles se clasifican en tres niveles de calidad. El nivel 1.0 consiste en las medidas brutas. El nivel 1.5 es la serie de datos de la que se han eliminado las medidas afectadas por

la nubosidad. El nivel 2.0 incluye los datos definitivos, tras una segunda calibración del instrumento al final del período en que ha estado en la estación.

Los datos en cada uno de los tres niveles son archivados y distribuidos desde el GSFC y están disponibles a través de la página web(introducir enlace), donde además se puede encontrar información actualizada sobre la red.

1.2.2. Climatología global de aerosoles.

Después de treinta años de medidas en la red, el numero de climatologías y análisis de las propiedades de aerosoles medidas en las diferentes estaciones (más de 600 a día de hoy) es extensa en la bibliografía. La mayoría de estos estudios incluyen análisis locales utilizando una o varias estaciones en una zona determinada de la tierra. Las climatologías globales son más reducidas. La más referenciada es la propuesta por Dubovik et al. (2002) y ha sido utilizada para generar los modelos de aerosol en la simulaciones propuestas en este trabajo. Estos modelos de aerosoles se han basado en las algunas de las estaciones de AERONET presentes en el mencionado trabajo y corresponden a los siguientes 5 modelos: Mongu (Zambia) que corresponde a combustión de biomasa, Mexico-City (Mexico) es un ejemplo aerosol urbano absorbente, Goddard Space Flight Center (Maryland-USA) representa el aerosol urbano no absorbente, Solar Village (Saudi Arabia) ejemplo de desértico puro, y Lanai (Hawaii-USA) que es un ejemplo de aerosol marítimo.

A mayores de estos modelos puros básicos, en las simulaciones se han considerado dos ejemplos de aerosol con diferentes propiedades ópticas para el modo fino y modo grueso para simular situaciones en las que el aerosol en columna es una mezcla de modos con índices de refracción sustancialmente diferentes. Se han considerado la mezcla de el humo de la combustión de biomasa (las propiedades del modo fino de ZAMB) y polvo mineral (propiedades del modo grueso de SOLV). La mezcla se ha realizado utilizando dos valores diferentes de las relaciones τ_f/τ_c a $440nm$ igual (1:1), que hemos denominado MIXT, y en la proporción 3:1 denominada MASH. Estas modelos mixtos con estas proporciones han sido ya utilizados en estudios de simulación previos como el publicado por Lopatin et al. (2013).

Los últimos dos modelos de aerosoles considerados en las simulaciones no provienen de análisis climáticos. Estos provienen de inversiones reales de AERONET (a partir de los datos de AOD y radiancias medidas en AERONET y siguiendo el código presentado por Dubovik and King 2000) y se han considerado ya que las distribución de tamaño obtenidas divergen de una distribuciones bimodal log-normal de los ejemplos previos de climatología (Dubovik et al. 2002). En AERONET no hay muchos ejemplos que diverjan de estos modelos bi-modales canónicos. En algunos casos aparecen pequeñas asimetrías en la distribución de tamaños: con la aparición de un tercer modo aparente cerca de uno principal formando una pequeña estructura pseudo estructura trimodal. En algunos casos más extremos una hay una pronunciada estructura trimodal con tres modos bien diferenciados. Estas anomalías trimodales se observan típicamente en inversiones de aerosoles localizadas cerca de niebla o nubes, fuertes eventos de quema de biomasa, algunas inversiones de polvo del desierto, penachos de aerosoles volcánicos, etc. (Eck et al. 2005, 2010, 2012, y Li et al 2014).

Las tres distribuciones de tamaño seleccionadas para las simulaciones incluyen: una distribución de tamaños que muestra una forma trimodal bien definida y dos distribuciones de tamaños sub-modos, uno en el modo fino y otro en el modo grueso. La estructura tri-modal corresponde a la distribución de

Código	Ubicación	Tipo de aerosoles
ZAMB	Mongu, Zambia (África Austral)	Aerosol producido por la combustión de biomasa, Aerosol continental
MEXI	Mexico City, Mexico (América del Norte)	Aerosol urbano/industrial
GSFC	Goddard Space Flight Center, Greenbelt, Maryland, USA (Norteamérica)	Aerosol urbano/industrial, Aerosol continental
LANA	Lanai, Hawaii, USA (Oceanía)	Aerosol marítimo, Aerosol desértico
MASH	Modelo mezcla 1:1	Aerosol urbano/industrial, Aerosol continental
MIXT	Modelo mezcla 3:1	Aerosol producido por la combustión de biomasa, Aerosol continental
SOLV	Solar Village, Saudi Arabia (Medio Oriente)	Aerosol desértico, Aerosol urbano/industrial
VOLC	Volcán Fuego, Guatemala (América Central)	Aerosol producido por la combustión de biomasa, Aerosol continental
DAKR	Dakar, Senegal (África Occidental)	Aerosol desértico, Aerosol urbano/industrial
KANP	Kanpur, India (Asia del Sur)	Aerosol urbano/industrial, Aerosol producido por la combustión de biomasa

Cuadro 1: Modelos de aerosoles utilizados en las simulaciones y basados en las medidas de AERONET

tamaño de volumen del aerosol obtenida por AERONET en GSFC el 24 de Junio de 1993 (figura 16 de Eck et al. 2010), cuando el aerosol volcánico del Pinatubo estaba presente en la estratosfera¹ (Holben et al. 1996), que hemos llamado VOLC. Hemos seleccionado la recuperación en el emplazamiento de Kanpur (India) el 5 de enero de 2006 a las 08:37 UTC (figura 3 de Eck et al. 2012, denominada como KANP) como el caso de aerosol con un sub-modo en el modo fino. Por último, la distribución que contiene un sub-modo en el modo grueso es de una inversión que contiene polvo del desierto. Este tipo de estructuras en el aerosol desértico es algo más común que las otras dos estructuras trimodales presentadas. De todos los ejemplos en las inversiones de AERONET, hemos seleccionado el del sitio de Dakar (Senegal) el 24 de febrero a las 08:56 UTC, durante la instalación de la campaña Shadow (Veselovskii et al. 2016). Este último ejemplo se denominará DAKR en las pruebas.

1.2.3. CIMEL

El fotómetro CIMEL es el instrumento estándar para todas las estaciones de la red de AERONET. Es un espectroradiómetro automático y de campo desarrollado en Francia por *Cimel Electronique*, y aunque ha contado con diversas versiones, ha sido siempre el instrumento utilizado por AERONET desde sus comienzos.



Figura 4: Imagen del radiómetro CE318-T obtenido en la página web www.cimel.fr/solutions/ce318-t/

El funcionamiento de este equipo se basa en realizar medidas de radiación proveniente de forma directa al Sol (para la obtención del AOD) como la dispersada en otras direcciones (radiancia del cielo) en una serie de longitudes de onda seleccionadas gracias a una serie de filtros interferenciales estrechos instalados en la cabeza sensora del radiómetro.

Cada uno de estos filtros, midiendo a las distintas fuentes de luz (Sol, cielo o Luna), define lo que se conoce como canales, los cuales corresponden a una longitud de onda específica, así como a unos coeficientes de calibración y amplificación electrónica específicos. Esto permite que, con un mismo detector, se puedan realizar medidas a las distintas fuentes de luz. El fotómetro está instalado en un robot seguidor de dos ejes (cenital y acimutal) que permite realizar medidas en distintas posiciones de la bóveda celeste. La programación de medidas y el tipo de medida a realizar en cada momento están gestionados por una caja de control que se encarga de realizar, de forma apropiada, la secuencia de medidas y es estandar en la red AERONET.

2. Objetivos

Este trabajo tiene como objetivo principal discernir la mejor metodología para inferir el AOD (550 nm) para las redes de radiómetros terrestres que no dispongan de este canal (AERONET, SKYNET). Como se comentará en la sección metodología los métodos analizados son: utilización directa del exponente de Ångström usando dos longitudes de onda, regresiones lineal Log-Log, regresiones cuadráticas Log-Log y el algoritmo GRASP-AOD.

3. Metodología

3.1. Tratamiento de datos

Se ha creado una metodología a través del empleo de pruebas de sensibilidad con el objetivo de obtener una estrategia óptima para la obtención del Aerosol Optical Depth (AOD) a 550 nm .

Este acercamiento consiste en el empleo de los 10 modelos de aerosoles presentados en la tabla 1, y a partir del uso del módulo radiativo de GRASP-Forward para simular los valores de AOD, incluyendo aquellos a las longitudes de onda estándar de AERONET(Cimel 318-T) y 550 nm . Para cada uno de los 10 modelos de aerosoles se usan 9 concentraciones diferentes de aerosoles en función del AOD(440 nm): 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2. Posteriormente, para cada tipo y concentración se introducen error lognormal (con $\sigma = 0,02$ correspondiente con el error esperado por los radiómetros solares) definiendo 10 conjuntos de medidas y errores para los valores de AOD correspondientes a los canales de AERONET. Este proceso resulta en la generación de 900 conjuntos de valores de AOD para los canales de AERONET con errores aleatorios creando así una base de datos suficientemente grande con la que trabajar.

Utilizando estos valores de AOD de la base de datos que se ha creado, testeamos las 6 técnicas estadísticas para obtener el valor de AOD(550 nm). Este valor es comparado con el valor “verdadero” obtenido mediante el módulo de forward. Posteriormente los valores serán discutidos en la sección de resultados.

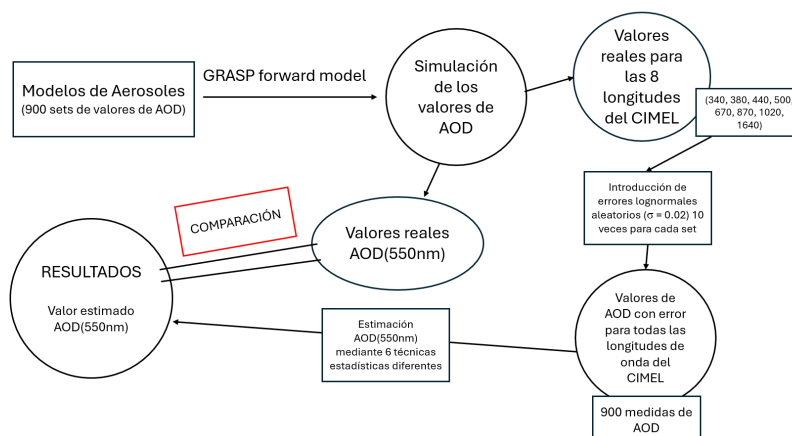


Figura 5: Diagrama metodológico seguido para realizar las pruebas de sensibilidad para evaluar el mejor enfoque para derivar el AOD a 550 nm

3.2. Exponente de Ångström

La dependencia espectral del scattering de Mie está relacionada con el tamaño de las partículas, en concreto por la relación entre el tamaño de la partícula y la longitud de onda de la radiación incidente. Por tanto el análisis de la forma espectral del espesor óptico de aerosoles es fundamental para la caracterización de los aerosoles mediante este tipo de medidas ópticas.

Para describir la forma espectral del espesor óptico de aerosoles, esto es, su dependencia con la longitud de onda, se utiliza otro parámetro muy sencillo, debido a Ångström (Ångström, 1961). Este autor propuso la siguiente expresión parametrizada, válida para un cierto rango espectral:

$$\tau_a = \beta \cdot \lambda^{-\alpha} \quad (5)$$

donde λ es la longitud de onda (en μm), α el parámetro o exponente de Ångström (relacionado con el tamaño del aerosol) y β es una constante que coincide con el espesor óptico correspondiente a $1\mu m$.

Teóricamente el parámetro alfa puede tomar valores entre 0 y 4. Los valores más bajos están asociados a partículas grandes, en las que la extinción no tiene dependencia espectral. Frente a esto, el scattering debido a partículas pequeñas tiene una fuerte dependencia espectral, y es mayor para las longitudes de onda más cortas. Como ejemplo tenemos el color azul del cielo, dado por el scattering de las moléculas (scattering Rayleigh), que es el límite inferior del tamaño, y cuya extinción depende en una potencia 4 con la longitud de onda. Para aerosoles lo habitual es que alfa varíe entre 0 y 2.5. Expresión que describe la dependencia espectral del espesor óptico de aerosoles.

Dependiendo de la distribución de tamaños de las partículas, la dependencia espectral del espesor óptico de aerosoles es dado aproximadamente por la siguiente ecuación:

$$\frac{\tau_\lambda}{\tau_{\lambda_0}} = \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right)^{-\alpha} \quad (6)$$

Donde τ_λ es el espesor óptico a la longitud de onda λ , y τ_{λ_0} es el espesor óptico en la longitud de onda λ_0

Conocido el espesor óptico a una longitud de onda y el exponente de Ångström, se puede estimar el espesor óptico a otra longitud de onda aplicando la relación anterior. Para conocer el valor del exponente de Ångström, se utiliza el valor de espesor óptico despejando de la ecuación anterior:

$$\alpha = - \frac{\log \left(\frac{\tau_{\lambda_1}}{\tau_{\lambda_2}} \right)}{\log \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)} \quad (7)$$

Para el cálculo de errores de este método he adaptado la expresión calculada en. Es la siguiente:

$$\Delta\alpha = \frac{\left[|2 \ln \lambda_1 - \ln \lambda_2| \cdot \frac{\Delta\tau_1}{\tau_1} + |2 \ln \lambda_2 - \ln \lambda_1| \cdot \frac{\Delta\tau_2}{\tau_2} \right]}{2 \sum \ln \lambda_i^2 - (\sum \lambda_i)^2} \quad (8)$$

Y obteniendo finalmente $\Delta\alpha$ en la expresión :

$$\Delta\tau_\lambda = \left(\frac{\lambda}{\lambda_0}\right)^{-\Delta\alpha} \tau_{\lambda_0} \quad (9)$$

Este método se ha usado para las dos longitudes de onda más lejanas: $340nm$ y $1640nm$ y las dos más cercanas : $500nm$ y $670nm$.

3.3. Regresión lineal Log-Log

En esta aproximación se han considerado por motivos históricos en el cálculo de medidas espectrales de AERONET, las longitudes de onda centrales, que incluyen $380, 440, 500, 670, 870nm$ y para su obtención suponemos que el AOD espectral sigue la siguiente expresión:

$$\ln(\tau) = f(\ln(\lambda)) = a \cdot \ln(\lambda) + b \quad (10)$$

En esta estimación consideramos que nuestro **AOD** o las τ - medidas siguen un modelo log-log lineal como función de la variable independiente λ (longitud de onda):

$$\ln(\tau) = f(\ln(\lambda)) = a \cdot \ln(\lambda) + b \quad (11)$$

Que puede ser escrita como un sistema de ecuaciones:

$$\begin{pmatrix} \ln(\lambda_1) & 1 \\ \ln(\lambda_2) & 1 \\ \dots & 1 \\ \ln(\lambda_N) & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ln(\tau_1) \\ \ln(\tau_2) \\ \dots \\ \ln(\tau_n) \end{pmatrix} \quad (12)$$

Que simplificada se puede escribir:

$$\lambda \times \vec{x} = \vec{\tau} \quad (13)$$

Tratándose de $\vec{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ el vector de los parámetros, el cuál es calculado mediante análisis estadístico para obtener el resultado que mejor se ajuste.

Por lo tanto el valor de $\tau(550)$ se obtiene mediante: $\tau_b = \vec{b}^T \cdot \vec{x}$ siendo $\tau_b = \ln(\lambda_{550})$ y $\vec{b} = \begin{pmatrix} \ln(\tau_{550}) \\ 1 \end{pmatrix}$

La solución para determinar este vector de parámetros desconocidos se obtiene mediante la minimización de la siguiente expresión cuadrática (también llamado residuo):

$$\Psi(\widehat{\vec{x}}) \iff \widehat{\vec{x}} = (\lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \lambda)^{-1} \cdot \lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \vec{\tau} \quad (14)$$

siendo λ , $\vec{x}$ y $\vec{\tau}$ las definidas previamente. C_τ^{-1} se trata de la matriz de peso, en la cuál C_τ es la matriz de covarianza basada en el conocimiento previo de los errores en las medidas $\ln(\tau)$. La minimización

de la expresión cuadrática, y por lo tanto el mejor valor para los parámetros del vector $\vec{x}$ se obtiene resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\Psi\left(\widehat{\vec{x}}\right)_{min} \iff \widehat{\vec{x}} = (\lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \lambda)^{-1} \cdot \lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \vec{\tau} \quad (15)$$

Para calcular ésta matriz se ha empleado la función **Polyfit**, obteniendo la matriz de parámetros desconocidos $\vec{x}$, en otras palabras regresión lineal del ajuste de la cuál obtener finalmente el valor τ (550). Una vez planteado esto, pasamos a tratar el cálculo de errores de las medidas. Trataremos dos casos típicos particulares de la matriz de covarianza C_τ .

3.3.1. Caso ideal 1º

No existen correlaciones, sólo elementos diagonales, con diferente error absoluto para cada medida, por lo que únicamente la varianza (cuadrado de los errores) es considerada : σ_i . La matriz tendría la siguiente forma:

$$C_\tau^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2^2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sigma_n^2} \end{pmatrix} \quad (16)$$

3.3.2. Caso ideal 2º

Parecido al caso anterior, pero en este caso tenemos el mismo error absoluto para todas las medidas $\sigma = \sigma_i$. Siendo el inverso de la matriz de covarianza por lo tanto:

$$C_\tau^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma^2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sigma^2} \end{pmatrix} \quad (17)$$

En estas condiciones, podemos prescindir de la matriz de covarianza de los errores y la solución sería obtenida mediante el método estándar de minimización del "método de los mínimos cuadrados simplificados". Éste método fue empleado previamente en las regresiones log-log:

$$\Psi\left(\widehat{\vec{x}}\right)_{min} \iff \widehat{\vec{x}} = (\lambda^T \cdot \lambda)^{-1} \cdot \lambda^T \cdot \vec{\tau} \quad (18)$$

En nuestro caso, inicialmente consideramos el segundo caso ideal ya que es empleado históricamente en los estudios de AERONET (derivados de la Ley Beer-Lambert y la calibración Vicarious) en el cuál tomábamos el mismo error absoluto para el set de τ medidas, siendo éste $\Delta\tau = 0,02$. Sin embargo, aunque tradicionalmente éste sea el método empleado, ésta asunción es errónea ya que nos encontramos trabajando en el espacio logarítmico y realizando el cálculo de la expresión en este caso tenemos:

$$f(\tau) = \ln \tau \Rightarrow \Delta[f(\tau)] = \frac{\partial \ln(\tau)}{\partial \tau} \cdot \Delta\tau = \frac{\Delta\tau}{\tau} \quad (19)$$

Por lo que la matriz de covarianza C_τ nos quedaría:

$$C_\tau = \begin{pmatrix} \left(\frac{\Delta\tau}{\tau_1}\right)^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \left(\frac{\Delta\tau}{\tau_n}\right)^2 \end{pmatrix} \quad (20)$$

Y la inversa:

$$C_\tau^{-1} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\tau_1}{\Delta\tau}\right)^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \left(\frac{\tau_n}{\Delta\tau}\right)^2 \end{pmatrix} \quad (21)$$

Finalmente, como se ha comentado anteriormente, una vez el vector de los parámetros desconocidos es calculado mediante métodos estadísticos, el valor de $\ln \tau_{550}$ puede ser calculado directamente con:

$$\tau_b = \vec{b}^T \cdot \vec{x} \quad (22)$$

siendo $\tau_b = \ln(\tau_{550})$ el valor buscado, $\vec{b} = \begin{pmatrix} \ln(\lambda_{550}) \\ 1 \end{pmatrix}$ el vector lambda y $\vec{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ el vector de los parámetros desconocidos.

El error en la estimación de $\ln \tau_{550}$ vendría dado por: $\Delta\tau_b = \vec{b}^T \cdot \Delta\vec{x}$ y la varianza es definida:

$$\sigma_{\tau_b}^2 = \vec{b}^T \cdot C_{\vec{x}} \cdot \vec{b} \quad (23)$$

Donde $C_x = \langle (\Delta\vec{x}) \cdot (\Delta\vec{x})^T \rangle = (\lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \lambda)^{-1}$ por la expresión final:

$$\sigma_{\tau_b}^2 = \vec{b}^T \cdot (\lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \lambda)^{-1} \cdot \vec{b} \quad (24)$$

Obteniendo así el cuadrado del error de $\ln(\tau_{550})$. El error de τ_{550} sería:

$$f(\ln(\tau)) = e^{\ln(\tau)} \Rightarrow \Delta\tau = \Delta[f(\ln(\tau))] = \frac{e^{\ln(\tau)}}{\partial \tau} \cdot \Delta \ln(\tau) = e^{\ln(\tau)} \cdot \Delta \ln(\tau) = \tau \cdot \Delta \ln(\tau) \quad (25)$$

Por lo que $\Delta \ln(\tau) = \sigma_{\tau_b}$ es directamente el error relativo del valor estimado de τ (550nm) Todo esto se ha realizado empleando dos argumentos en la función **Polyfit**.

Por un lado pasamos como argumento **w** la matriz de covarianza C_τ^{-1} , también llamado el peso relativo de cada medida.

Por otro lado, activamos el argumento **cov = True** para obtener como salida la matriz de correlación de los parámetros desconocidos $C_{\vec{x}}$.

Una vez programado todo esto, ya somos capaces de obtener tanto el valor de τ (550nm) como el de su error $\Delta\tau$ (550nm).

3.4. Regresión cuadrática Log-Log

En esta estimación consideramos que nuestro **AOD** o las τ - medidas siguen un modelo log-log Quadratic como función de la variable independiente λ (longitud de onda):

$$\ln(\tau) = f(\ln(\lambda)) = a \cdot \ln(\lambda)^2 + b \cdot \ln(\lambda) + c \quad (26)$$

Que puede ser escrita como un sistema de ecuaciones:

$$\begin{pmatrix} \ln(\lambda_1)^2 & \ln(\lambda_1) & 1 \\ \ln(\lambda_2)^2 & \ln(\lambda_2) & 1 \\ \dots & \dots & 1 \\ \ln(\lambda_N)^2 & \ln(\lambda_N) & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ln(\tau_1) \\ \ln(\tau_2) \\ \dots \\ \ln(\tau_n) \end{pmatrix} \quad (27)$$

Que simplificada se puede escribir:

$$\lambda \times \vec{x} = \vec{\tau} \quad (28)$$

Tratándose de $\vec{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ el vector de los parámetros de la función 28, el cuál es calculado mediante análisis estadístico para obtener el resultado que mejor se ajuste.

Por lo tanto el valor de $\tau(550nm)$ se obtiene mediante: $\tau_b = \vec{b}^T \cdot \vec{x}$ siendo $\tau_b = \ln(\lambda_{550})$ y $\vec{b} = \begin{pmatrix} \ln(\lambda_{550})^2 \\ \ln(\tau_{550}) \\ 1 \end{pmatrix}$

La solución para determinar este vector de parámetros desconocidos se obtiene mediante la minimización de la siguiente expresión cuadrática(también llamado residuo):

$$\Psi(\widehat{\vec{x}}) \iff \widehat{\vec{x}} = (\lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \lambda)^{-1} \cdot \lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \vec{\tau} \quad (29)$$

siendo λ , $\vec{x}$ y $\vec{\tau}$ las definidas previamente. C_τ^{-1} se trata de la matriz de peso, en la cuál C_τ es la matriz de covarianza basada en el conocimiento previo de los errores en las medidas $\ln(\tau)$. La minimización de la expresión cuadrática, y por lo tanto el mejor valor para los parámetros del vector $\vec{x}$ se obtiene resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\Psi(\widehat{\vec{x}})_{min} \iff \widehat{\vec{x}} = (\lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \lambda)^{-1} \cdot \lambda^T \cdot C_\tau^{-1} \cdot \vec{\tau} \quad (30)$$

Para calcular ésta matriz se ha empleado la función **Polyfit**, obteniendo la regresión cuadrática del ajuste de la cuál obtener finalmente el valor $\tau(550nm)$. Una vez planteado ésto, pasamos a tratar el cálculo de errores de las medidas.

El cálculo de errores es análogo al explicado para Log-Log lineal, pero teniendo en cuenta que al tratarse de una regresión cuadrática, y por lo tanto ser de orden superior, se adaptarían las ecuaciones a las recién descritas en este apartado.

Se han considerado dos casos para éste método: semejante a Log-Log Lineal, por motivos históricos en el cálculo de medidas espectrales de AERONET, el primer método considera las longitudes de onda

centrales, que incluyen 380, 440500, 670y870nm, mientras que el segundo considera todas las longitudes de onda: 340, 380, 440500, 670, 870, 1020, 1640nm

3.5. GRASP-AOD

GRASP es el acrónimo de "Generalized Retrieval of Aerosol and Surface Properties" (ver Dubovik et al., 2014) y es un algoritmo de inversión de medidas atmosféricas (más información y una versión gratuita del código completo se pueden obtener en <http://www.grasp-open.com/>, último acceso: 1 de septiembre de 2024). El código implementa un ajuste estadísticamente optimizado de diversas observaciones utilizando el concepto de método de mínimos cuadrados (LSM) multi-término (ver Dubovik y King, 2000; Dubovik, 2004). En consecuencia, la recuperación se organiza como una búsqueda de solución en un espacio continuo de soluciones sin el uso tradicional de tablas pre-calculadas (look-up tables). El algoritmo GRASP es altamente versátil y puede aplicarse a una gran variedad de mediciones de teledetección (por ejemplo, fotómetros solares, lidars, imágenes satelitales, etc.). El concepto de GRASP, originado en el algoritmo de Dubovik y King (2000), se ha utilizado con éxito durante 30 años para procesar las observaciones de AERONET de radiómetros solares/cielo basados en tierra (Holben et al., 1998).

GRASP cuenta con dos módulos independientes. El primero es un módulo de inversión numérica que incluye operaciones matemáticas generales no relacionadas con ninguna propiedad física natural de los datos invertidos. Esta inversión numérica se implementa como un ajuste estadísticamente optimizado siguiendo la estrategia de mínimos cuadrados multi-término (LSM).

El segundo módulo de GRASP es el modelo directo de transferencia radiativa conocido como *forward model*. Al igual que el módulo de inversión numérica, se ha desarrollado de manera universal para simular diversas observaciones de teledetección atmosférica con alta precisión. Como resultado, GRASP es un algoritmo altamente versátil que puede aplicarse a una amplia gama de observaciones atmosféricas pasivas y activas, tanto desde satélite como desde estaciones en tierra. Está diseñado de manera inherente para realizar inversiones sinérgicas cuando diferentes observaciones se invierten simultáneamente. Dependiendo de los datos de entrada, GRASP puede obtener propiedades detalladas de los aerosoles tanto en columna como en perfiles verticales, así como la reflectancia de la superficie. En las inversiones de GRASP se pueden utilizar diversas aproximaciones para modelar las propiedades de aerosoles y superficies, junto con diferentes restricciones a priori.

GRASP-AOD (Torres et al. 2017 y Torres y Fuertes, 2021) es una aplicación dentro de GRASP que ha sido diseñada para obtener propiedades microfísicas de los aerosoles a partir de medidas de AOD, sin necesidad de utilizar radiación difusa. La ausencia de información sobre la dispersión, que contiene datos esenciales para derivar una caracterización detallada de los aerosoles, obliga a hacer una serie de aproximaciones y simplificaciones para ajustar el modelo de aerosol utilizado en las inversiones la información real disponible. Como fue antes comentado, el algoritmo GRASP cuenta con un modelo directo altamente flexible que permite que esto sea posible y en este sentido, las distribuciones de tamaño de los aerosoles invertidas se aproximan a distribuciones lognormales bimodales que se describen con solo seis parámetros: radio medio volumétrico (r_{Vi}), desviación estándar (σ_{Vi}) y concentración volumétrica (CV_i) para los modos fino y grueso (en lugar de distribuciones de tamaño más detalladas con 22 bins como en la inversión estándar de AERONET). La aplicación asume el índice de refracción complejo como en el procedimiento de inversión. Los detalles completos de la inversión de GRASP-AOD y las consecuencias de las diferentes suposiciones pueden obtenerse en Torres et al. 2017 y las referencias allí

citadas.

4. Resultados: Interpolación - AOD 550nm

Como se ha explicado previamente, se expondrá la correlación entre los valores verdaderos y los estimados calculados a partir de los 6 métodos analizados en el estudio del **AOD 550nm**.

Cabe señalar que en cada gráfica representada, los puntos están coloreados de forma diferente para cada tipo de aerosol: **DAKR** en azul marino, **GSFC** en naranja, **KANP** en verde, **LANA** en rojo, **MASH** en violeta, **MEXI** en marrón, **MIXT** en rosa, **SOLV** en gris, **VOLC** en verde oliva y **ZAMB** en azul claro. En el **eje X** figura el valor real de la DMA a 550nm y en el **eje Y** los valores obtenidos por cada método para los 900 puntos de datos. Al título de cada método se le ha asignado un código de colores para indicar la calidad de la correlación.

4.1. Resultados previos a corrección de error

La Figura 6 muestra las relaciones entre los valores reales y estimados de AOD(550nm) para los seis métodos de interpolación explicados anteriormente.

La correlación menos favorable corresponde al método Ångström two furthest, con un $R = 0,956$, el menor de todos y un valor $RMSE = 0,096$.

Este resultado es probablemente influenciado por dos factores: la linealidad imperfecta de la Ley de Ångström 5 y el hecho de que los valores más bajos de AOD se encuentran a 1640nm, lo que otorga un mayor peso al error absoluto en esta longitud de onda.

Los métodos que siguen son Log-Log lineal, Log-Log Quadratic (todas las longitudes de onda) y GRASP-AOD. Éstos tres muestran correlaciones con un $R = 0,997$ y unos valores similares de $RMSE = 0,022$, 0,021 y 0,024 respectivamente.

Por último, los métodos que ofrecen los resultados más precisos son el exponente de Ångström con las dos longitudes de onda más cercanas y Log-Log Quadratic con las longitudes de onda centrales (340-870nm) siendo su $R = 0,999$ en ambos y su $RMSE = 0,015$ y 0,016 respectivamente.

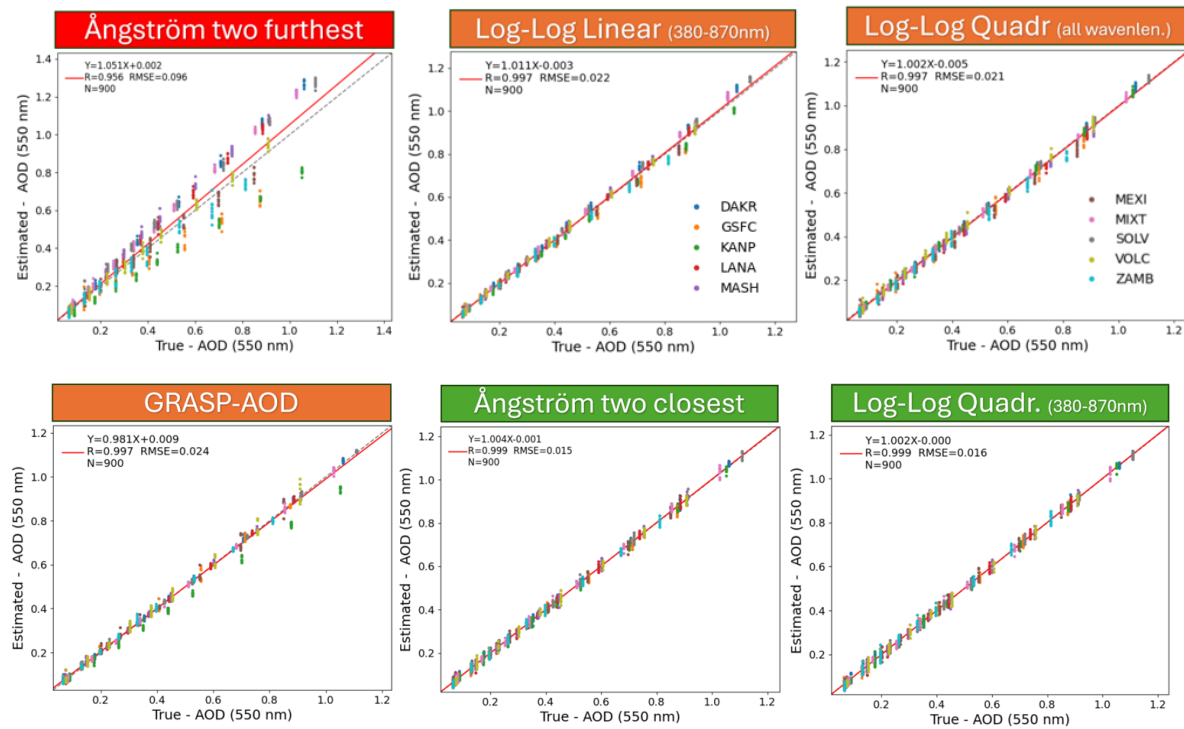


Figura 6: Se ilustran las correlaciones entre los valores reales y las estimaciones de **AOD** 550nm para los seis métodos. El título de cada panel está codificado por colores para representar la calidad de la correlación, proporcionando una representación visual del rendimiento del método. Los puntos de cada panel están coloreados para distinguir entre los 10 tipos de aerosoles: **DAKR** en azul marino, **GSFC** en naranja, **KANP** en verde, **LANA** en rojo, **MASH** en violeta, **MEXI** en marrón, **MIXT** en rosa, **SOLV** en gris, **VOLC** en verde oliva y **ZAMB** en azul claro.

4.2. Resultados finales

Posterior a la revisión de la matriz de covarianza en los métodos Log-Log, obtenemos los resultados finales que podemos observar en la Figura 7, siendo los métodos Log-Log los únicos afectados por tal modificación, tal que: el resultado menos favorable sigue perteneciendo a Ångström two furthest, mientras que el método Log-Log Linear muestra una ligera mejora en su $R = 0,997 \Rightarrow 0,998$ y su $RMSE = 0,022 \Rightarrow 0,021$ y GRASP-AOD no presenta variaciones significativas.

Finalmente, los métodos que presentan los resultados más precisos son Ångström two closest $R = 0,999$ y $RMSE = 0,015$, Log-Log Quadratic con las longitudes de onda centrales (340-870nm) $R = 0,999 \Rightarrow 0,999$ y su $RMSE = 0,016 \Rightarrow 0,015$ y Log-Log Quadratic (todas las longitudes de onda) presentando la mayor mejora $R = 0,997 \Rightarrow 0,999$ y su $RMSE = 0,021 \Rightarrow 0,013$.

Aunque los tres últimos métodos arrojan resultados similares, la utilización del Log-log Quadratic, que incorpora una gama más amplia de longitudes de onda, pueden presentar una ventaja: su gama ampliada de longitudes de onda podría mejorar potencialmente la robustez del análisis, proporcionando una mitigación más eficaz de los sesgos sistemáticos, en particular los derivados de errores de calibración en canales específicos.

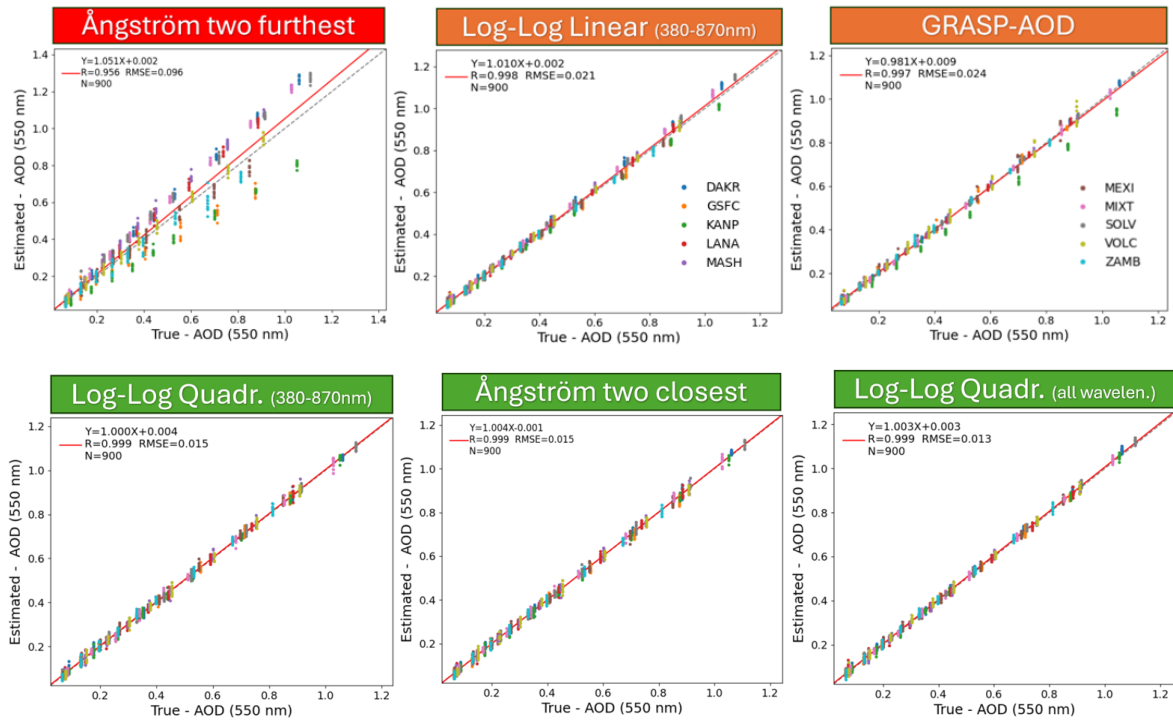


Figura 7: Se ilustran las correlaciones entre los valores reales y las estimaciones de **AOD 550nm** para los seis métodos estadísticos con la corrección en la matriz de covarianza en los métodos Log-Log

Para comprobar esta idea, en la Figura 8 repetimos el mismo análisis que en la Figura 7, pero introduciendo un sesgo sistemático de $+0,03$ en la longitud de onda de 500 nm, además de los errores aleatorios en todas las longitudes de onda ya presentados en el análisis de la Figura 7. Esta prueba sólo se realiza para los métodos Ångström two closest y Log-log quadratic longitudes de onda centrales y todas las longitudes de onda.

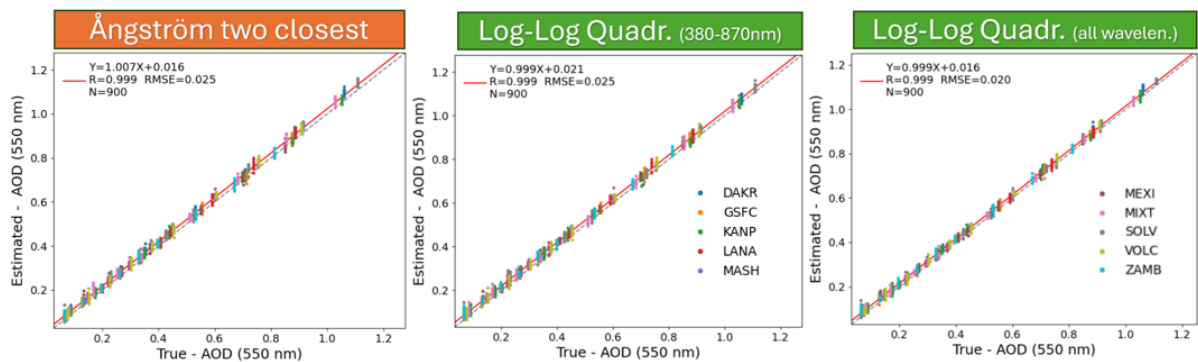


Figura 8: Comparación del rendimiento de los métodos *Ångström two closest* , *Log-log quadratic (longitudes de onda centrales)* y *Log-log quadratic (todas las longitudes de onda)* bajo la influencia de un sesgo sistemático ($+0,03$) introducido en la longitud de onda de 500nm, además de errores aleatorios en todas las longitudes de onda de la figura X.

Lo primero que observamos con la introducción del error sistemático de $+0,03$ en la Figura 8, en com-

paración con los resultados de la Figura 7, es que las ordenadas en el origen son bastante diferentes de cero, lo cual tiene sentido: dada la proximidad del valor de 500 nm al de 550 nm, sobrestimar el valor de AOD a 500 nm podría introducir razonablemente un sesgo en el valor estimado a 550 nm para ambos métodos. Notablemente, Log-log Quadratic (longitudes de onda centrales) se ve menos afectado, con un sesgo de 0,016 frente a 0,012. Además, el RMSE aumenta para ambos casos cuando se compara con el escenario sin el sesgo introducido (anteriormente, en la figura 7, igual a 0,016 para ambos casos). Una vez más, el uso de la cuadrática Log-Log (longitudes de onda centrales) produce resultados superiores con un RMSE de 0,021, comparado con el 0,025 obtenido con Ångström dos más cercano. La inclusión de más longitudes de onda, que atenúan el sesgo introducido a 550 nm, es probablemente el principal factor que contribuye a este mejor rendimiento de Log-Log cuadrática (longitudes de onda centrales).

Por último, nos gustaría destacar el potencial de mejora de la caracterización de la AOD a 550 nm obtenida mediante la metodología GRASP-AOD filtrando los resultados de la recuperación en función del residuo de inversión. Filtrar los resultados en inversiones avanzadas es un paso lógico, y se proporcionan directrices para evaluar la calidad de las inversiones GRASP-AOD tanto en Torres et al. 2017 como en Torres y Fuertes 2021. En la Figura 9, examinamos las correlaciones de AOD a 550 nm obtenidas usando GRASP-AOD para todos los casos (panel izquierdo, equivalente al de la Figura 8, filtrado por un residuo en el error total de 0,03 (panel central) y filtrado por un residuo en el error total de 0,02 (panel derecho).

La observación inicial en la Figura 9 es que el filtrado por error mejora las correlaciones. El RMSE se reduce a 0,013 y 0,011 al aplicar filtros por residuos (error absoluto) de 0,02 y 0,03, respectivamente. Ambos valores son menores que las mejores correlaciones obtenidas en la Figura 7: Ångström dos más cercana y Log-log cuadrática (longitudes de onda centrales).

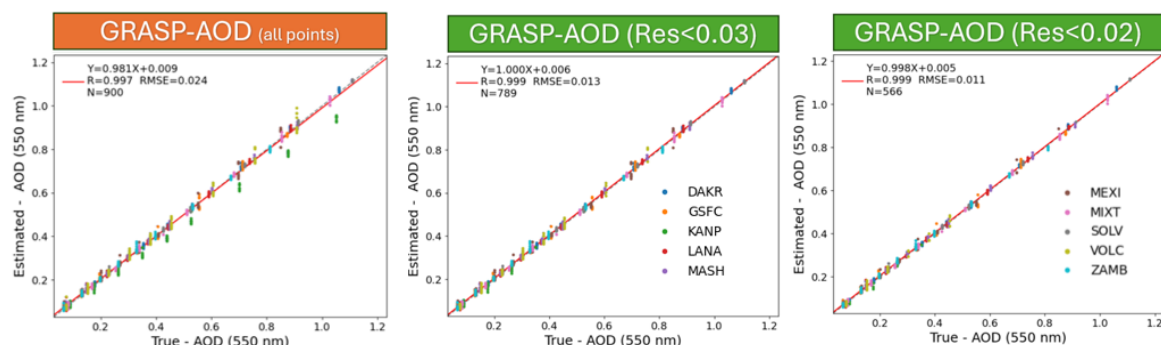


Figura 9: Se presentan las correlaciones de **AOD** 550nm obtenidas mediante la metodología **GRASP-AOD** para todos los casos (panel izquierdo), y tras aplicar filtros basados en los residuos de inversión: filtrado por un residuo en el error total de 0,03 (panel central) y filtrado por un residuo en el error total de 0,02 (panel derecho).

Tenga en cuenta que un filtro no podría aplicarse directamente a la metodología Ångström two closest (ya que está definida por una línea que pasa por dos puntos). Sin embargo, podríamos definir un filtro de calidad para Log-log cuadrática (longitudes de onda centrales) basado en la calidad de cada correlación log-log cuadrática individual (para cada una de las líneas grises de la Figura 2). Este filtro probablemente eliminaría los conjuntos de datos con los mayores errores aleatorios. Aunque no se ha aplicado en este análisis inicial, se tendrá en cuenta en futuros trabajos.

Obviamente, el filtrado de los resultados de la metodología GRASP-AOD por el residuo conduce a una

reducción de los puntos de datos, que disminuyen de 900 a 788 y 567, respectivamente. Visualmente, observamos que el filtro inicial (0,03) elimina los puntos de datos que visualmente están más alejados de la línea de correlación 1:1 a 550 nm, como se indica con un círculo en el panel izquierdo. Estos puntos de datos corresponden a modelos de aerosoles que contienen tres modos, especialmente KANP y VOLC (puntos verde y verde oliva). Por tanto, este filtrado inicial no parece excluir las inversiones con altos errores aleatorios en los respectivos AOD espectrales. En su lugar, elimina puntos de datos con errores elevados en la determinación de la AOD a 550 nm, probablemente causados por una suposición inadecuada, en este caso, la bimodalidad, en la recuperación GRASP-AOD. Ignorar el tercer modo (ya que se asume una estructura bimodal al utilizar GRASP-AOD) es una fuente significativa de error en la estimación del espesor óptico espectral del aerosol. De hecho, los errores asociados a un modelo de aerosol deficiente pueden tratarse como otras fuentes de error (por ejemplo, intrínseco a las mediciones; véase Dubovik, 2004) para estimar la incertidumbre de la recuperación. Por lo tanto, la estructura de tercer modo de KANP y VOLC produce un error sistemático que afecta al ajuste o residuo de recuperación para GRASP-AOD (y la determinación de AOD a 550 nm). Nótese aquí que la eliminación de 112 puntos con este primer filtro relacionados con una estructura de tres modos pronunciada no puede extrapolarse directamente a un análisis con datos reales, ya que la aparición de estas estructuras es un evento raro en los datos de AERONET y aquí representa el 20 – 30 % de los casos considerados. Por otro lado, el segundo filtro (0,02) elimina los datos de todos los tipos de aerosoles y está sin duda más relacionado con la influencia de los errores aleatorios en la recuperación.

5. Conclusiones

Este estudio se ha realizado con la finalidad de inferir el valor de AOD(550nm) a partir de las medidas espectrales de AOD obtenidas de la red de AERONET.

A partir de los resultados obtenidos, se observa que todos los métodos para obtener el valor de AOD(550nm) ofrecen unas correlaciones correctas, oscilando los valores de R desde $R = 0,956$ a $R = 0,999$, tanto antes como después de realizar el cambio en la matriz de covarianza para los ajustes Log-Log. Sin embargo, gracias a esta corrección, el método Log-Log Quadratic (todas las longitudes de onda) es posicionado como el resultado más preciso, con un $R = 0,999$ y un $RMSE = 0,013$, además de mejorar ligeramente los otros dos ajustes Log-Log.

Tradicionalmente, en los estudios de AERONET se ha considerado un valor constante de error absoluto para todas las medidas simuladas, resultando muy conveniente pero poco apropiado. El cálculo riguroso de la matriz de covarianza como se ha detallado en el segundo caso ideal de la regresión Log-Log lineal, conduce a resultados más precisos e incluso a la optimización de uno de los métodos, convirtiéndolo en el más eficiente.

La introducción del sesgo sistemático para los tres mejores ajustes confirma nuevamente que el método Log-Log Quadratic (considerando todas las longitudes de onda) sigue siendo el más adecuado, debido a su mayor robustez en el análisis, derivada de su capacidad para abarcar una amplia gama de longitudes de onda.

6. Referencias

1. Ångström, A. Techniques of determining the turbidity of the atmosphere. *Tellus*, 13, 214–223. (1961)
2. Cachorro et al. Determination of the angstrom turbidity parameters. *Appl. Opt.*, 26(15), 3069–3076. (1987)
3. Dubovik et al. Variability of absorption and optical properties of key aerosol types observed in worldwide locations. *Journal of the atmospheric sciences*, 59(3), 590–608. (2002)
4. Dubovik, O., and M. D. King, A flexible inversion algorithm for retrieval of aerosol optical properties from Sun and sky radiance measurements, *J. Geophys. Res.*, 105(D16), 20673–20696, doi:10.1029/2000JD900282. (2000)
5. Dubovik, O., Lapyonok, T., Litvinov, P., Herman, M., Fuertes, D., Ducos, F., Torres, B., Derimian, Y., Huang, X., Lopatin, A., Chaikovsky, A., Aspetsberger, M., and Federspiel, C.: GRASP: a versatile algorithm for characterizing the atmosphere, in: *SPIE*, vol. Newsroom, <https://doi.org/10.1117/2.1201408.005558> (2014).
6. D’Almeida, *Atmospheric Aerosol: Global Climatology and Radiative Characteristics*. A Deepak Publishing Hampton, VA (USA). (1991)
7. Eck et al. Columnar aerosol optical properties at AERONET sites in central eastern Asia and aerosol transport to the tropical mid-Pacific. *J. Geophys. Res.*, 110, D06202, doi:10.1029/2004JD005274. (2005)
8. Eck et al. Robust optical features of fine mode size distributions: Application to the Québec smoke event of 2002. *J. Geophys. Res.*, 110, D11207, doi:10.1029/2004JD005157. (2005)
9. Eck et al. Climatological aspects of the optical properties of fine/coarse mode aerosol mixtures. *J. Geophys. Res.*, 115, D19205, doi:10.1029/2010JD014002. (2010)
10. Eck et al. An analysis of AERONET aerosol absorption properties and classifications representative of aerosol source regions. *J. Geophys. Res.*, 117, D17203, doi:10.1029/2012JD018127. (2012)
11. González, R. "Desarrollo de nuevos métodos de procesamiento de datos de redes fotométricas para el análisis de propiedades del aerosol atmosférico", Tesis Doctoral, Universidad de Valladolid. (2021)
12. Holben et al. AERONET—A Federated Instrument Network and Data Archive for Aerosol Characterization, *Remote Sensing of Environment*, Volume 66, Issue 1, Pages 1-16, ISSN 0034-4257, [https://doi.org/10.1016/S0034-4257\(98\)00031-5](https://doi.org/10.1016/S0034-4257(98)00031-5). (1998)
13. Hobbs, Peter v. *Introduction to Atmospheric Chemistry*. Cambridge University Press. (2000)
14. Kasten and Young, Revised Optical Air Mass Tables and Approximation Formula. *Appl. Opt.*, 28, 4735–4738. (1989)
15. Li et al, Recent trends in aerosol optical properties derived from AERONET measurements. *Atmos. Chem. Phys.*, 14, 12271–12289, <https://doi.org/10.5194/acp-14-12271-2014>. (2014)
16. Lopatin, A., Dubovik, O., Chaikovsky, A., Goloub, P., Lapyonok, T., Tanré, D., and Litvinov, P.: Enhancement of aerosol characterization using synergy of lidar and sun-photometer coincident observations: the GARRLiC algorithm, *Atmos. Meas. Tech.*, 6, 2065–2088, <https://doi.org/10.5194/amt-6-2065-2013>, (2013).

17. Mie, G. Tratado de Electricidad y Magnetismo (Traducción de la 2ª edición alemana), Ed. Manuel Marín, Barcelona, (1944)
18. Seinfeld, John H. - Pandis, Spyros N. Atmospheric Chemistry and Physics. From Air Pollution to Climate Change. *Physics Today* 1 October 1998; 51 (10): 88–90. <https://doi.org/10.1063/1.882420>. (1998)
19. Shaw, G. Error analysis of multi-wavelength sun photometry. *Pure and Applied Geophysics*, 114, 1–14. (1976)
20. Toledano, C. Climatología de los aerosoles mediante la caracterización de propiedades ópticas y masas de aire en la estación .^{E1} Arenosillo” de la red AERONET”, Tesis Doctoral, Universidad de Valladolid. (2005)
21. Torres, B., et al. Advanced characterisation of aerosol size properties from measurements of spectral optical depth using the GRASP algorithm, *Atmos. Meas. Tech.*, 10, 3743–3781, <https://doi.org/10.5194/amt-10-3743-2017>, (2017).
22. Torres, B. y Fuertes, D. . “Characterization of aerosol size properties from measurements of spectral optical depth: a global validation of the GRASP-AOD code using long-term AERONET data”. *Atmos. Meas. Tech.*, 14, 4471–4506, <https://doi.org/10.5194/amt-14-4471-2021>. (2021)
23. Torres y Fuertes, A Comprehensive Description of Multi-Term LSM for Applying Multiple a Priori Constraints in Problems of Atmospheric Remote Sensing: GRASP Algorithm, Concept, and Applications. *Front. Remote Sens.* 2:706851. doi: 10.3389/frsen.2021.706851 (2021)
24. Vergaz, Propiedades ópticas de los aerosoles atmosféricos. Caracterización del área del Golfo de Cádiz. Tesis doctoral, Universidad de Valladolid. (2001)
25. Wallace, John M. - Hobbs, Peter V., Atmospheric science: an introductory survey. Academic Press. (2006)
26. Willeke y Baron, Aerosol Measurement. Principles, Techniques and Applications. VNR. (1993)