

**MÁSTER UNIVERSITARIO EN
CIENCIA Y TECNOLOGÍA ESPACIAL**

TRABAJO FIN DE MÁSTER

***IMPLEMENTACIÓN DE API EN PYTHON PARA EL
PLANETARY SPECTRUM GENERATOR Y
APLICACIÓN A LAS ATMÓSFERAS PLANETARIAS***

Estudiante	<i>Munguira, Ruiz, Asier</i>
Director/a	<i>Pérez, Hoyos, Santiago</i>
Departamento	<i>Física Aplicada I</i>
Curso académico	<i>2019-2020</i>

Bilbao, 15, Septiembre, 2020

Resumen

La espectroscopía aplicada a la observación de las atmósferas planetarias permite obtener una gran cantidad de información acerca de las mismas. En particular, en los rangos visible e infrarrojo del espectro reflejado podemos caracterizar sus nubes y nieblas superiores, así como su distribución vertical. Por otro lado, en el espectro térmico se obtiene información directa acerca del perfil térmico de las atmósferas, a diversos niveles en función de las longitudes de onda o frecuencias empleadas. Una de las herramientas disponibles para todo ello es el Planetary Spectrum Generator¹ (PSG) de NASA Goddard Space Flight Center. En este proyecto se implementa la API (Application Program Interface) en Python para poder realizar llamadas al código y a sus herramientas de inversión desde un servidor cliente. El código ha sido implementado modularmente, de modo que puede responder a diferentes condiciones de observación en las distintas atmósferas, tanto de planetas del Sistema Solar como de planetas extrasolares. Este método ha sido utilizado en el estudio de diversos escenarios para evaluar la sensibilidad y capacidades del procedimiento.

Laburpena

Espektroskopiaren bitartez, informazio ugari lortu daiteke planeten atmosferen buruz. Bereziki, erreflexatutako espektroaren ikusgai eta infragorri tartean behatuz, atmosferaren konposatuen kokapen bertikala bereizi daiteke, hodei eta guzti. Bestalde, espektro termikoak atmosferaren maila bertikal ezberdinen temperatura inferitzea ahalbidetzen du, frekuentzia tartearan arabera. Guzti hau lortzeko eskuragarri dagoen erreminta bat NASA Goddard Space Flight Center-en Planetary Spectrum Generator (PSG) da. Lan honen koska, bere API (Application Program Interface) Python-en inplementatzea izan da, bere kodeari eta inbertsio tresnei modu lokalean deitu ahal izateko. Idatzitako kodea moldakorra izan dezan blokeetan antolatu da. Era honetan atmosferetako edozein problema fisikori aurre egiteko gai da. Metodo hau fenomeno ugari ikertzeko erabili da, bere sentsibilitate eta ahalmena balioztatzeko helburuarekin.

Abstract

The spectroscopy technique applied to the field of planetary atmospheres allows us to gain a lot of knowledge about them. In particular, focusing our studies on the visible and near IR range of the reflected spectra we are able to characterize their vertical compound profile, including the clouds and hazes present. Additionally, from the thermal spectra the vertical temperature profile can be inferred for some atmospheric levels, depending on the sounded frequencies. One of the tools that allows these analysis is the Planetary Spectrum Generator of NASA Goddard Space Flight Center. The purpose of this project is to implement its API (Application Program Interface) in a Python code to call the packages within PSG from a local server. The code has been written per modules in such a way that it is extensible for any physical scenario that takes place in the atmospheres, provided that PSG is able to fit it. This applies not only to the Solar System's atmospheres, but also to extrasolar planets. Various scenarios have been examined with this method in order to assess the sensibility and potential of the performance.

Palabras clave

atmósferas, espectroscopía, transporte radiativo, *retrieval*, Planetary Spectrum Generator, interfaz

¹<https://psg.gsfc.nasa.gov/>

Índice General

Índice General	0
1. Introducción y objetivos	1
1.1. Introducción	1
1.2. Objetivos	2
2. Fundamento teórico	3
2.1. Transporte Radiativo	3
2.1.1. Aproximaciones de interés	3
2.1.2. Conservación de la energía	6
2.2. Espectroscopía	7
2.3. Perfil vertical de temperatura y emisión térmica	9
2.3.1. Atmósfera isoterma	9
2.3.2. Atmósfera con gradiente de temperatura constante	10
2.3.3. Atmósfera con gradiente de temperatura variable	11
2.4. Problema inverso: Retrieval	12
3. Método experimental	15
3.1. Planetary Spectrum Generator	15
3.2. Implementación de API desde Python	18
3.3. Resolución del problema inverso	22
3.3.1. Retrieval 1D	24
3.3.2. Retrieval 2D	31
3.3.3. Retrieval N -D	33
4. Resultados	37
4.1. Disminución de CH_4 en Urano	37
4.2. Banda de $15 \mu m$ del CO_2 en Marte	41
4.2.1. Breve descripción de la atmósfera de Marte	42
4.2.2. Espectro térmico de los planetas rocosos	43
4.2.3. <i>retrieval</i> de $T(P)$ en Marte	45
4.3. Tránsito primario del exoplaneta GJ 1214b	54
4.3.1. Introducción a GJ 1214b y su espectro en transmisión	55
4.3.2. Inferencia de la temperatura atmosférica en GJ 1214b	56
4.3.3. Perfil vertical de temperatura	58
5. Conclusiones	61
5.1. Implementación de la API	61
5.2. Aplicación a atmósferas planetarias	61
5.3. Ampliación y mejoras propuestas	63
Bibliografía	65
Apéndice A. Función de edición para generar una niebla en 3D	67

1 Introducción y objetivos

1.1. Introducción

Hace unos 3.500 millones de años, la vida se abrió paso en el planeta Tierra. Entonces, una atmósfera primordial muy distinta a la actual recubría el planeta (Sanchez-Lavega, 2011), hasta que los fenómenos naturales y la interacción de ésta con los organismos biológicos propició una incesante inyección de O_2 , amén de un decrecimiento gradual de CO_2 . Esta evolución padecida por la atmósfera favoreció que las especies abandonaran su zona de confort en el hábitat acuático, naciendo así los primeros exploradores. El humor vítreo y acuoso son a la par un indicio de la evolución por selección natural y de nuestros orígenes, ya que para que las especies acuáticas pioneras pudieran percibir la luz del entorno debían compensar el índice de refracción del agua. No obstante, un ojo especialmente diseñado para especies terrenas podría evadir muchas enfermedades e imperfecciones oculares con una disposición distinta que trabajase en un mismo medio: el aire. Este hecho es muy significativo porque implica que no estamos diseñados para ser perfectos superhéroes (o de lo contrario tendríamos alas), sino que nuestro diseño tiene un fuerte vínculo con el de las especies antecesoras. No obstante, la evolución nos ha colmado de virtudes a cada una de las especies dando lugar a una biodiversidad fascinante. Fue tan solo hace unos pocos millones de años cuando un simio desarrolló un potencial comparable a un superpoder que desembocó en el *Homo sapiens*: la curiosidad y la imaginación. La capacidad de hacer ciencia se puede atribuir nada más y nada menos que a este ‘superpoder’, ya que entre todas las preguntas que ha inducido algunas respuestas han resultado ser las adecuadas.

Entre todos los aspectos del conocimiento que conmueven al ser humano, destaca por su atractivo la búsqueda de otros mundos donde la vida haya proliferado. Curiosamente, la madre Tierra es el único ejemplo conocido sobre el que podemos poner nuestra mira, de donde se extrae que la atmósfera es fundamental para estudiar el clima y la habitabilidad de un planeta, aunque ésta última también debe verse favorecida por aspectos como el campo magnético del planeta, su inclinación axial o la insolación estelar, que junto con posibles fuentes internas de calor de un planeta determina su perfil de temperatura. La composición, presión y temperatura atmosféricas son pilares que rigen la física de las atmósferas, y por tanto su habitabilidad: las reacciones químicas y distribución vertical de compuestos, los niveles de condensación de distintos compuestos, la protección ante la radiación ionizante o el efecto invernadero son sólo algunos ejemplos. Otra característica importante de las atmósferas es su dinámica, dependiente no sólo de gradientes de temperatura y presión, sino también de la masa, radio y velocidad de rotación del planeta. En el presente texto, al igual que aquellos peces, seguimos sacando provecho de la luz para satisfacer nuestras necesidades. El problema del transporte radiativo, que nosotros aplicaremos a las atmósferas, estudia la interacción radiación-materia (absorción, emisión y *scattering*); el principio de conservación de la energía conduce a su ecuación fundamental, en la que de una u otra forma intervienen multitud de los parámetros atmosféricos mencionados. Aún hay muchas preguntas abiertas que motivan el estudio exhaustivo del problema de transporte radiativo en tantas atmósferas como sea posible, ya que es la mejor técnica de adquisición de información acerca de las mismas.

En este proyecto se ha continuado la línea del Trabajo de Fin de Grado (Munguira, 2019), donde se inició la aproximación a la senda del transporte radiativo y se trabajó con modelos directos de Júpiter en el Planetary Spectrum Generator (PSG) para caracterizar su niebla absorbente en el azul. Ya entonces se concibió que una interfaz local del PSG otorgaría un sinfín de posibilidades adicionales. Entre ellas, la que se presenta en este proyecto poniendo en práctica los conocimientos de programación adquiridos durante las prácticas de verano en la empresa Deimos Space: la inferencia de parámetros atmosféricos a partir de espectros observados. En física es habitual realizar predicciones a partir de la inserción de unas condiciones iniciales en un modelo físico. Sin embargo, el proceso puede ser revertido para inferir los valores de los parámetros de un modelo a partir de unas observaciones (‘problema inverso’). Dado que el PSG cuenta con una herramienta de *retrieval* para afrontar la resolución del problema inverso, la interfaz local no tendrá más que comunicarse con ésta. El código para realizar las llamadas a la API del PSG se ha escrito en Python cuidando que se mantenga la generalidad y versatilidad del propio PSG, para lo que el programa se ha modularizado hasta el extremo. Además, se ha querido desarrollar un segundo método de *retrieval* para que ambos puedan testarse a la par.

Este proyecto está estrecha o transversalmente ligado a numerosas asignaturas del Máster en Ciencia y Tecnología Espacial. A pesar de que se ha volcado hacia un enfoque científico, en relación a la formación del estudiante, las nociones de instrumentación adquiridas en las asignaturas de ‘Detectores y Sensores’ y ‘Fundamentos de Instrumentación Óptica’ han sido relevantes en dos sentidos: a la hora de decidir con qué resolución espectral trabajar y para entender los inconvenientes que pueden surgir en la adquisición del espectro y cómo pueden afectar a la relación S/N, especialmente crítica al estudiar exo-atmósferas. En ‘Materiales para el Espacio I: Fundamentos’ se estudiaron también los tres mecanismos de transferencia de calor: conducción, convección y radiación. Estos modelan el perfil térmico de las atmósferas, y su estudio avivó el interés que ya profesaba por el transporte de energía. En la segunda parte del máster, los laboratorios de la asignatura de ‘Interferometría Espacial’ no sólo estimulan la exploración espacial, desde mi punto de vista, sino que han contribuido a continuar una formación orientada hacia el rigor y la meticulosidad científica. Por ello, la estimación de errores y las consiguientes barras de error han tratado de cuidarse a lo largo del proyecto. Por último, cabe destacar las cuatro asignaturas donde he depositado con sumo gusto un sinfín de horas y perseverancia a fin de obtener como rédito la ansiada base teórica y capacidad para resolver problemas de forma imaginativa: ‘Astronomía y Astrofísica’, ‘Física de la Atmósfera Terrestre’, ‘Atmósferas Planetarias’ y ‘Física del Sistema Solar’. En la medida de lo posible, en las cuatro he orientado mi estudio a las atmósferas y a cualquier detalle vinculado a este trabajo, para afrontarlo en las condiciones óptimas. En particular, los temas de ‘Espectroscopía’ y ‘Estructura térmica’ de la tercera asignatura mencionada cuentan con una presencia explícita en este proyecto.

1.2. Objetivos

Este proyecto se puede catalogar en el marco de dos objetivos fundamentales. Por un lado, se quiere implementar un código en Python que sin pérdida de generalidad tenga la capacidad de explotar la API de PSG hasta su máximo rendimiento. El segundo objetivo consiste en inferir los parámetros de una atmósfera a partir de un espectro observado, para lo que se cuenta con el modelo de transporte radiativo del PSG, basado en el código Planetary and Universal Model of Atmospheric Scattering, PUMAS (Edwards, 1992; Villanueva et al., 2015). El interés de estos parámetros, que podría abarcar libros enteros, se ha tratado de plasmar en la Introducción. Por otro lado, esta inferencia requiere de la resolución del problema inverso, que en este caso se aborda con la herramienta de *retrieval* del PSG y con un método local.

En este contexto, tienen cabida numerosos objetivos secundarios que quedan reflejados en cada una de las partes del trabajo. En el Capítulo 2 se sientan las bases teóricas para la consecución del proceso de obtención y análisis de resultados. Algunos fundamentos de mayor presencia en Munguira (2019) no se han vuelto a abordar y se remite al lector a dicha referencia y a las que en ella se mencionan. En el Capítulo 3 se recoge la metodología: se introduce la herramienta PSG, la interfaz escrita en Python y la combinación de ambos en la resolución del problema inverso. En la Sección 3.3, mediante un ejemplo conocido, se valora el desempeño de los dos métodos de *retrieval* propuestos. Por último, en el Capítulo 4 se ha aplicado la misma metodología a diversos escenarios dentro y fuera del Sistema Solar, que abarcan el espectro en reflexión, emisión y transmisión. La inmersión en el rango térmico y en el campo de exoplanetas es otra diferencia fundamental con respecto al TFG. El propósito de esta diversidad de casos no es otro que testar la metodología para un amplio abanico de problemas y proponerla como una alternativa a otros códigos de transporte radiativo y de inversión ya existentes. Por último, en las conclusiones se establecerá un vínculo entre todos los resultados emergentes y se sintetizará lo más destacable del trabajo.

2 Fundamento teórico

En este capítulo se abordan los conceptos teóricos cruciales para la comprensión del proyecto. El planteamiento del problema del transporte radiativo ha sido ampliado para el rango térmico desde Munguira (2019). Sin embargo, las funciones de fase de *scattering*, cuya base fue plasmada en el TFG, han sido omitidas en esta sección por la distinta naturaleza del trabajo. En su lugar, el *scattering* se plantea en las simplificaciones de la ecuación de transporte radiativo y, el efecto de nubes y aerosoles sobre el espectro se resume dentro de la sección dedicada a espectroscopía. Por tratarse de algo nuevo, intrincado y con fuerte presencia en el proyecto, se ha dedicado una sección al vínculo entre el espectro emitido y el perfil vertical de temperatura. Finalmente, se define el problema inverso y los métodos de *retrieval* que han intervenido en su solución.

2.1. Transporte Radiativo

En esta sección se va a estudiar la interacción de la radiación con la materia en el seno de una atmósfera. Los fenómenos físicos a los que se somete la radiación proveniente de una estrella cuando ésta alcanza una atmósfera planetaria son la emisión, absorción y dispersión (o *scattering*). Mientras que el primero de estos procesos aumenta la cantidad de radiación saliente que se percibe y el segundo provoca un desvanecimiento del haz, el último es capaz de eliminar radiación en algunas direcciones para añadirla en otras. En una capa nubosa gruesa el *scattering* produce una radiación difusa en todas las direcciones, así que contribuye en cierto grado a la radiación reflejada y transmitida por la atmósfera en direcciones diferentes a la del haz directo. Este tipo de nube es una gran fuente de opacidad y, en general, la porción de radiación que escapa será diferente en cada dirección.

Un principio físico fundamental que rige el balance de energía en la atmósfera es el de conservación de la energía, que permite obtener la ecuación básica del transporte radiativo (RT, por sus siglas en inglés). Pensemos en un haz de radiación monocromático que al atravesar un medio se ve reducido por su interacción con la materia. Sea ρ la densidad del medio y ds el espesor recorrido por el haz en su dirección de propagación, la reducción de la intensidad del haz incidente I_λ viene dada por (Liou, 2002):

$$dI_\lambda = -\kappa_\lambda \rho I_\lambda ds \quad (1)$$

donde κ_λ es el coeficiente de extinción por sección eficaz, que depende de la longitud de onda, λ , del haz. En base a lo expuesto anteriormente, el coeficiente de extinción debe incluir un término proveniente de la absorción y otro del *scattering*. Por otro lado, para designar los efectos que fortalecen el haz de radiación en una longitud de onda específica se introduce la llamada ‘función fuente’, J_λ . Estos efectos serán el *scattering* múltiple (cuando reintroduce radiación en nuestro haz) y la emisión de la superficie y la propia atmósfera, resultando finalmente que la ecuación general de transporte radiativo se escribe como sigue:

$$\frac{dI_\lambda}{\kappa_\lambda \rho ds} = -I_\lambda + J_\lambda \quad (2)$$

En este punto, con tantas contribuciones que perturban el haz, conviene presentar una serie de aproximaciones que allanan el camino para resolver la ecuación y entender los conceptos básicos.

2.1.1. Aproximaciones de interés

Radiación de cuerpo negro y ley de Wien

Un cuerpo emite una energía como consecuencia de su temperatura, T . En primera aproximación, la intensidad de la radiación emitida se describe por medio de la función de Planck para la emisión de un cuerpo negro:

$$B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5(e^{hc/K_B\lambda T} - 1)} \quad (3)$$

En la Ecuación 3, h es la constante de Planck, c la velocidad de la luz en el vacío y K_B la constante de Boltzmann, de donde se deduce que la radiación emitida por un cuerpo depende únicamente de su temperatura y de la longitud de onda. La ley de Wien es el resultado de derivar esta función con respecto a λ para conocer en qué longitud de onda se encuentra el máximo de emisión:

$$\lambda_{max} = \frac{0.0028976 \text{ m} \cdot \text{K}}{T} \quad (4)$$

De esta ecuación se deduce que el máximo de emisión solar ($T_{eff} = 5778 \text{ K}$) ocurre en el entorno de $\lambda = 0.5 \mu\text{m}$. Por tanto, la radiación del Sol se podrá despreciar al estudiar, por ejemplo, la emisión de Marte a $T_{eff} \approx 222 \text{ K}$ (Sanchez-Lavega, 2011), cuyo máximo está localizado en el entorno de $\lambda_{max} \approx 13 \mu\text{m}$, lo que se conoce como el rango térmico del espectro. Asimismo, la emisión del planeta es despreciable en su espectro reflejado. Por último, si el cuerpo no fuese un emisor perfecto, se podría utilizar la aproximación de cuerpo gris para la intensidad emitida por un cuerpo de emisividad ε :

$$I_e = \varepsilon \cdot B_\lambda(T) ; \quad 0 < \varepsilon < 1 \quad (5)$$

Aproximación de atmósfera plano-paralela

Una atmósfera plano-paralela es aquella en la que la distancia recorrida por el haz de radiación es suficientemente pequeña con respecto al radio planetario como para ignorar todos los efectos asociados a la esfericidad (Liou, 2002). La geometría del problema requiere que se hagan las modificaciones pertinentes en la ecuación general de transporte radiativo.

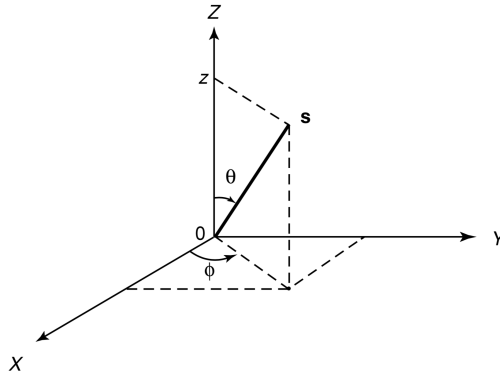


Figura 2.1: Geometría para atmósferas plano-paralelas. Imagen tomada de Liou (2002).

Recordemos que si s es la distancia recorrida por el haz en el interior de la atmósfera, \hat{s} denota la dirección de propagación del haz incidente. Ahora nuestro sistema de coordenadas vendrá descrito por la profundidad en la dirección normal a los estratos de la atmósfera, z ; el ángulo polar o cenital θ , que conecta \hat{s} con el cenit \hat{z} y el ángulo acimutal ϕ . Se reescribe la Ecuación 2 introduciendo el sistema de coordenadas de la Figura 2.1:

$$\cos\theta \frac{dI_\lambda(z; \theta, \phi)}{\kappa_\lambda \rho dz} = -I_\lambda(z; \theta, \phi) + J_\lambda(z; \theta, \phi) \quad (6)$$

Y también se define el espesor óptico:

$$\tau_\lambda = \int_z^\infty \kappa_\lambda \rho dz' = \int_z^\infty \beta_e dz' \quad (7)$$

El límite superior de la integral es infinito, en el caso más general, porque es muy complicado definir la frontera superior de una atmósfera. Para espesores ópticos mayores que la unidad se considera que la atmósfera es opaca a la radiación (Sanchez-Lavega, 2011), mientras que si $0 < \tau_\lambda < 1$ la atmósfera posee cierta transparencia en la longitud de onda correspondiente. Con el fin de plantear el problema de forma más precisa, se definen los coeficientes de extinción (e), *scattering* (s) y absorción (a), para cada longitud de onda, en función de la densidad de partículas que haya en una región, $n(z)$, y de la sección eficaz σ de las mismas, que depende entre otras cosas del tamaño de las partículas:

$$\beta_{e,s,a} = \frac{1}{\Delta z} \int_{\Delta z} \sigma_{e,s,a} n(z) dz \quad (8)$$

con $\beta_e = \beta_s + \beta_a$. Bajo esta aproximación de atmósfera plano-paralela, el problema de RT se reducirá a resolver:

$$\mu \frac{dI_\lambda(\tau_\lambda; \mu, \phi)}{d\tau_\lambda} = -I_\lambda(\tau_\lambda; \mu, \phi) + J_\lambda(\tau_\lambda; \mu, \phi) \quad (9)$$

Es habitual realizar el cambio de variable: $\mu = \cos\theta$. A partir de este momento, se omitirán los subíndices λ a placer, será suficiente recordar que cada longitud de onda estudiada puede suponer una física diferente en este modelo de RT y por lo tanto, se deberán computar las ecuaciones aquí expresadas para cada longitud de onda de forma independiente.

Atmósfera puramente dispersiva

Empecemos viendo qué ocurre cuando se puede despreciar la contribución de J_λ (Ley de Beer-Bouguer-Lambert), por ejemplo si se estudia el espectro reflejado de un planeta del Sistema Solar en una situación que no requiera caracterizar el *scattering* múltiple. Considerando que $I_\lambda(0)$ es la intensidad incidente (en $z = 0$) e integrando la Ecuación 2 para $J_\lambda = 0$ se tiene que la intensidad emergente a una distancia z tras atravesar un espesor óptico τ es:

$$I_\lambda(\tau) = I_\lambda(0) \exp\left(-\int_0^\tau \kappa_\lambda \rho \frac{dz}{\mu}\right) = I_\lambda(0) e^{-\tau/\mu} \quad (10)$$

que simplificará aún más las ecuaciones de RT en el caso de que estemos tratando el problema en regiones atmosféricas que se puedan aproximar como homogéneas (κ_λ y ρ serán parámetros característicos para cada una de esas regiones) y donde se puedan despreciar los términos aditivos. Un buen ejemplo de esto puede ser una capa muy poco densa en la que el *scattering* múltiple sea despreciable cuando la iluminamos con luz solar de longitud de onda mucho más corta que las longitudes de onda térmicas en las que mayoritariamente emite. En una capa delgada, se puede aproximar que la radiación sólo sufre un proceso de *scattering*. Esta última situación se conoce como aproximación de *scattering* único. Un ejemplo de ello en la Tierra es cuando se ve un cielo cubierto de nubes finas, tipo cirro, pero se distingue el Sol tras ellas de forma nítida.

Otra magnitud relevante, conocida como albedo de *scattering* único, da cuenta de la fracción de radiación que se extingue debido al *scattering*:

$$\omega_0 = \frac{\beta_s}{\beta_e} \quad (11)$$

En los casos límite, si $\omega_0 = 1$ implica que toda la radiación se ha extinguido en procesos de *scattering*, mientras que si $\omega_0 = 0$ la extinción es puramente debida a la absorción del medio. Con

el sistema de coordenadas que se ha definido se puede incorporar al análisis la función de fase $P(\mu, \phi; \mu', \phi')$, que expresa la probabilidad de que un fotón proveniente de la dirección (μ', ϕ') sea dispersado en la dirección (μ, ϕ) . El tamaño y la forma de las partículas es clave para entender cómo se difunde la luz, y por tanto para determinar la forma de dicha función (Hansen and Travis, 1974). A continuación, se plantea la ecuación del RT con la contribución del *scattering* múltiple para la intensidad emergente en una atmósfera semi-infinita (Liou, 2002):

$$\mu \frac{dI(\tau; \mu, \phi)}{d\tau} = I(\tau; \mu, \phi) - \frac{\omega_0}{4\pi} F_{\odot} P(\mu, \phi; -\mu_0, \phi_0) e^{-\tau/\mu_0} - \frac{\omega_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 I(\tau; \mu', \phi') P(\mu, \phi; \mu', \phi') d\mu' d\phi' \quad (12)$$

F_{\odot} es el flujo estelar interceptado en la parte superior de la atmósfera y, la dirección de inmersión en la atmósfera se ha elegido como $-\mu$. En la parte derecha de la ecuación, el segundo término describe la atenuación del haz directo que se refleja en la dirección (μ, ϕ) tras recorrer un espesor óptico τ , y el último término se refiere a la radiación difusa que emerge en la dirección (μ, ϕ) tras dispersarse en el nivel τ , a donde la luz puede llegar en todas las direcciones (μ', ϕ') a causa del *scattering* múltiple.

Medio no dispersivo

La ecuación general del transporte radiativo (Ecuación 9) es compleja de resolver analíticamente. Gran parte de esta dificultad radica en los fenómenos de *scattering*. Sin embargo, en el estudio espectroscópico del rango térmico la radiación estelar es despreciable¹ por el argumento aportado con la ley de Wien. Además, en dicho rango dominan los fenómenos de absorción y emisión, así que el *scattering* puede ser a menudo desechado. En este caso particular, se escribe la intensidad emergente $I(0, \mu, \phi)$ asumiendo que hay sensibilidad a la emisión de la superficie del planeta² y por tanto la luz atraviesa un espesor óptico τ_S , y que las emisiones se aproximan bien por la radiación de cuerpo negro (Hanel et al., 2003):

$$I(0, \mu, \phi) = I(\tau_S, \mu, \phi) e^{-\tau_S/\mu} + \int_0^{\tau_S} e^{-\tau/\mu} B(\tau) \frac{d\tau}{\mu} \quad (13)$$

Al igual que en el caso anterior se analiza el significado de cada término: el primero de la derecha será la intensidad emitida en la superficie $I(\tau_S)$ en la dirección de observación (μ, ϕ) tras atenuarse debido a la absorción sufrida en su paso a través de la atmósfera; el segundo término recoge la contribución de cada una de las capas atmosféricas a la intensidad emitida total.

2.1.2. Conservación de la energía

Se define la transmitancia monocromática, T_{λ} , como la fracción de la radiación incidente que se transmite a través de la atmósfera.

$$T_{\lambda} = \frac{I_{\lambda}(z, \tau)}{I_{\lambda}(0)} \quad (14)$$

De la misma forma, la absorptividad monocromática A_{λ} será la porción de radiación absorbida en una longitud de onda determinada, mientras que la reflectividad monocromática R_{λ} es la radiación solar reflejada por la atmósfera hacia fuera de la misma. Entonces, por conservación de la energía debe satisfacerse la siguiente expresión:

$$T_{\lambda} + A_{\lambda} + R_{\lambda} = 1 \quad (15)$$

¹Esto es así para los planetas del Sistema Solar, pero no es extensible a Júpiteres calientes, por ejemplo

²Si sólo hubiera sensibilidad a la emisión de la atmósfera (como por ejemplo en Venus) la ecuación seguirá siendo válida generalizando el significado de τ_S al espesor óptico que atraviesa la radiación hasta salir de la atmósfera.

En el caso de la mayoría de gases (exceptuando los más abundantes que originan la dispersión de Rayleigh) y en el rango térmico, el *scattering* no es importante y la ecuación de conservación de la energía se reduce a:

$$T_\lambda + A_\lambda = 1 \quad (16)$$

El PSG no solo genera espectros, sino también las transmitancias de los constituyentes del modelo atmosférico. En numerosos escenarios, la transmitancia en cada longitud de onda del espectro tendrá una correspondencia directa con las bandas de absorción.

2.2. Espectroscopía

Los problemas de RT pueden dividirse en tres grupos mayoritarios en función de la geometría y el tipo de radiación estudiada. Cada uno de ellos da lugar a un espectro en reflexión, en transmisión o en emisión. En el análisis del espectro en reflexión es común emplear unidades de longitud de onda, λ , para definir el intervalo espectral. Equivalentemente, es conveniente emplear dichas unidades en la representación del espectro transmitido. Sin embargo, el espectro emitido por un planeta es usualmente representado en unidades de número de onda, ν . Esta magnitud se define como el inverso de la longitud de onda:

$$\nu = \frac{1}{\lambda} \quad (17)$$

Como la energía es directamente proporcional a ν , con esta magnitud resulta más sencillo interpretar la energía asociada a cada región espectral. En general, el espectro térmico de los planetas abarca el IR medio y está modulado por transiciones moleculares que producen bandas de absorción y emisión. A diferencia de los átomos, que sólo pueden albergar transiciones entre niveles electrónicos mediante la interacción con un fotón muy energético, las moléculas tienen numerosos niveles de energía adicionales por el desdoblamiento a causa de los grados de libertad vibracionales y rotacionales (Sanchez-Lavega, 2011). Las energías asociadas a las transiciones entre dichos niveles son menores, lo que sitúa las líneas de absorción y emisión más habituales de las moléculas en el IR. En algunos casos, hay numerosos niveles rotacionales instalados alrededor de un nivel vibracional³, muy juntos entre sí. A baja resolución, el solapamiento de todos ellos producirá lo que se denomina una banda de absorción o emisión roto-vibracional entorno al nivel vibracional. Ejemplo de ello es la banda de $\lambda = 15 \mu m$ ($\nu = 667 \text{ cm}^{-1}$) del CO_2 , que adquiere un papel protagonista en el posterior estudio del perfil vertical de temperatura en Marte.

Resolución espectral

La Figura 2.2 muestra el espectro típico de la banda mencionada para cuatro valores de la resolución. A mayor resolución espectral ($\Delta\nu = 0.3 \text{ cm}^{-1}$ en la Figura 2.2) se muestrean un mayor número de energías asociadas a los fotones que intervienen en las transiciones moleculares, por lo que el espectro presenta las líneas roto-vibracionales localizadas en dichas energías. A medida que la resolución disminuye, ésta no es suficiente para percibir los fotones asociados a determinadas energías y el número de líneas se reduce hasta que finalmente se solapan, formando bandas. Por conservación de la energía la intensidad total de la región espectral debe mantenerse, así que el continuo subirá o bajará moderadamente para compensar las líneas emergentes o eclipsadas por la resolución. Si se baja la resolución en exceso, algunos rasgos pueden desaparecer del espectro ($\Delta\nu = 10 \text{ cm}^{-1}$ en Figura 2.2). Por lo tanto, antes de proceder a un análisis espectroscópico es imprescindible conocer la resolución requerida para estudiar el fenómeno de interés.

³El gap entre niveles vibracionales de energía es típicamente mayor que 600 cm^{-1} , mientras que en los rotacionales va desde 1 cm^{-1} hasta 500 cm^{-1} (Liou, 2002)

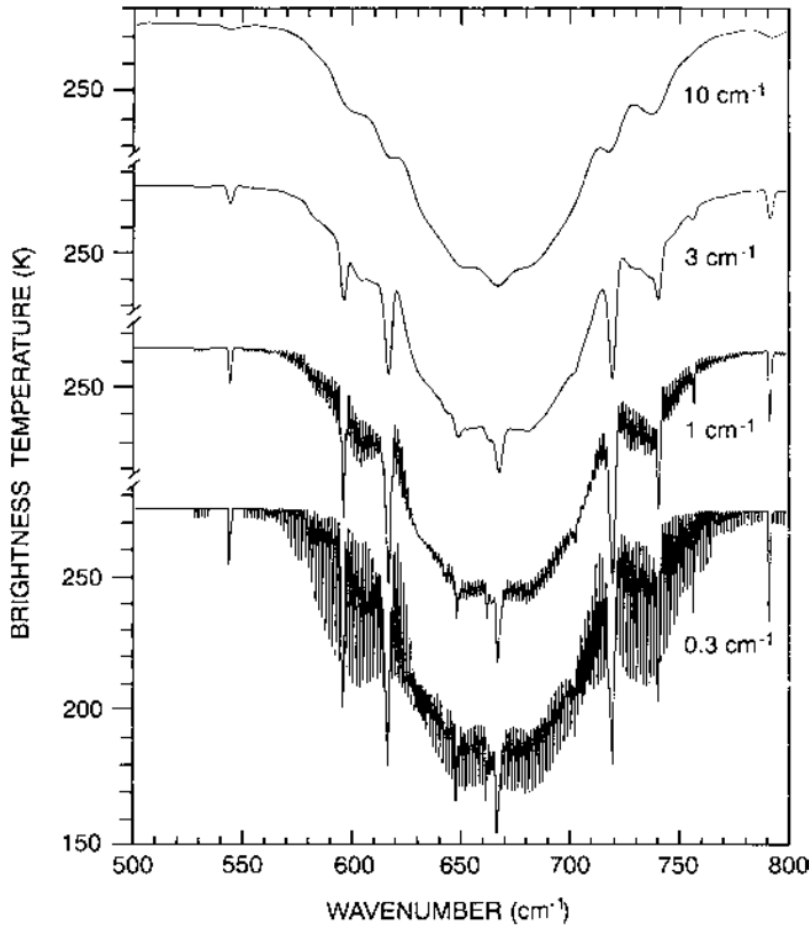


Figura 2.2: Banda de 15 μm del CO_2 en Marte a distintas resoluciones. Imagen tomada de Hanel et al. (2003).

Características fundamentales de una banda

Una banda de absorción o emisión se divide en dos fragmentos: la parte central y las alas. La primera es la región espectral atribuida a la máxima opacidad de la atmósfera. Esto implica que los fotones detectados en la parte central de la banda se atribuyen a los niveles atmosféricos más altos que han sido advertidos. Sin embargo, la menor opacidad en las alas propicia la detección de fotones que recorren un mayor camino por el interior de la atmósfera, otorgando sensibilidad a capas más profundas. Además, las alas poseen una variabilidad superior, como se irá viendo a lo largo del proyecto (Por ejemplo, Figura 2.4).

Existen varios fenómenos que dan lugar a un ensanchamiento de las alas. Los dos más comunes son el ensanchamiento por presión y el debido al desplazamiento Doppler. A medida que aumenta la presión atmosférica, la banda se ve ensanchada en las alas porque los fenómenos de absorción y emisión van acompañados de colisiones entre partículas del gas que extienden los *gaps* entre niveles energéticos. A bajas presiones, el ensanchamiento Doppler cobrará más importancia. Éste se debe al desplazamiento en la frecuencia que padecen los fotones emitidos o absorbidos como consecuencia del movimiento de las moléculas (Sanchez-Lavega, 2011), que a su vez no es homogéneo sino que sigue la distribución de Maxwell-Boltzmann. Es bien conocido que dicha distribución depende de la masa de las partículas y de la temperatura. Equivalentemente, estos conceptos quedan sintetizados asumiendo que en general la absorción de las distintas capas atmosféricas depende de la presión y temperatura en la región:

$$\kappa_\lambda = \kappa_\lambda(z) = \kappa_\lambda(T, P) \quad (18)$$

En equilibrio termodinámico local, lo que no siempre se cumple en atmósferas planetarias, el

gradiente vertical de temperatura, $\Gamma = dT/dz$, es el factor que determina si un gas produce una banda espectral en absorción ($\Gamma < 0$) o emisión ($\Gamma > 0$). Por este motivo el espectro térmico emitido por un planeta está estrechamente ligado al perfil vertical de temperatura en su atmósfera.

Nubes y aerosoles

Fundamentalmente, la alta reflectividad de las nubes propicia un aumento del flujo reflejado que eleva el continuo en todo el rango visible e IR cercano (Sanchez-Lavega, 2011). Por su parte, el papel de los aerosoles está vinculado al tamaño y tipo de partículas. Mientras que algunos son absorbentes a tener muy en cuenta, otros son incapaces de absorber la radiación por su escasa sección eficaz y abundancia, pero sin embargo generan una dispersión de Rayleigh notoria en la atmósfera (Marley et al., 2013). En general, la dependencia de la transmitancia de las nubes con la longitud de onda es suave por la naturaleza sólida (hielos) o líquida (gotas) de las partículas condensadas, que ensanchan las bandas de absorción aplanando el espectro. En el rango térmico del espectro la dependencia de nubes y aerosoles con la longitud de onda sigue el mismo patrón: las nubes aumentan la opacidad de la atmósfera apreciablemente en un amplio rango espectral, ocultando la emisión térmica de la superficie; los aerosoles también incrementan la opacidad y pueden elevar el nivel efectivo de emisión, pero su acción está más localizada en determinadas longitudes de onda.

2.3. Perfil vertical de temperatura y emisión térmica

El perfil vertical de temperatura de una atmósfera, expresada en términos de la presión $T(P)$ o de la altura $T(z)$ según el caso, da cuenta del estado de equilibrio térmico alcanzado en cada capa de la misma con la ayuda de los mecanismos de transporte de calor con los que se distribuye la energía incidente en la atmósfera. En general, las fuentes de radiación internas son las provenientes del interior del planeta y/o la propia atmósfera, mientras que las externas bañan la atmósfera y/o la superficie con sus emisiones (Sanchez-Lavega, 2011). El perfil $T(P)$ es uno de los ingredientes fundamentales para comprender las atmósferas planetarias porque otorga un sinnúmero de información que contribuye al estudio de numerosos aspectos, como las regiones de condensación de los compuestos, la presencia de aerosoles o la dinámica atmosférica, que también se ve afectada por el gradiente horizontal de temperatura y supone un pilar fundamental para el estudio del RT, ya que influye sobre los tres fenómenos que dominan la interacción radiación-materia.

Como se ha mencionado en la Sección 2.2, el gradiente vertical de temperatura determina si las líneas características de los compuestos aparecen en absorción o emisión en el espectro térmico. Sabiendo que el espesor óptico de la atmósfera depende de la longitud de onda, en cada una de ellas existe sensibilidad a una región de la atmósfera diferente, en función de la transparencia u opacidad de la atmósfera en dicha λ . Partiendo de estas nociones, se va a concretar la relación entre el espectro de emisión de un planeta y el perfil $T(P)$ de su atmósfera, con el fin de resolver el problema inverso que constituye. La inferencia del perfil $T(P)$ a partir de un espectro térmico observado es viable centrando el estudio sobre una banda espectral, siempre que ésta esté lo suficientemente aislada de otras aportaciones al RT en dicha región espectral (Hanel et al., 2003). En esta sección se analiza cualitativamente parte de la información sobre el $T(P)$ accesible por esta técnica. Para ello, se consideran algunos perfiles $T(P)$ de carácter general y las peculiaridades que inducen en el espectro térmico.

2.3.1. Atmósfera isoterma

El primer caso considerado va a ser el de una atmósfera isoterma ($T(P) = Cte$). Al hilo del razonamiento de la Sección 2.1 se va a despreciar, por simplicidad, la influencia del *scattering* en el espectro de emisión. Esta aproximación quedaría justificada por la relación entre el tamaño típico de las partículas atmosféricas y las largas longitudes de onda del espectro térmico. En la Figura 2.3 se muestra el esquema de las contribuciones a la intensidad total. Las temperaturas efectivas de emisión de la superficie y de la atmósfera serán T_S y T_A , respectivamente.

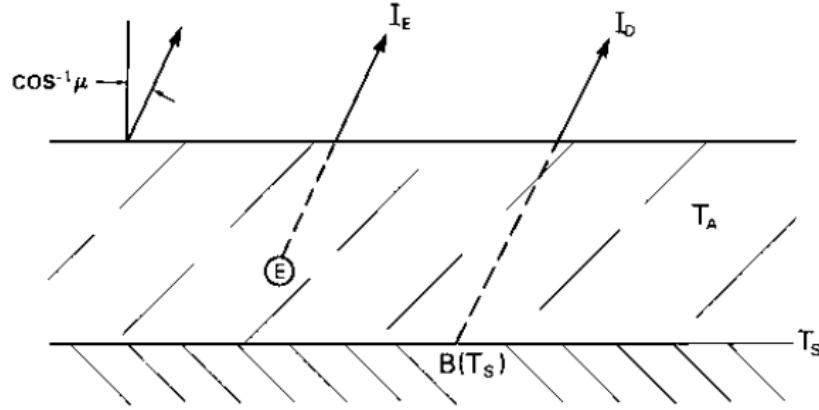


Figura 2.3: Modelo de radiación emitida por una superficie y una atmósfera isoterma no dispersiva. Imagen tomada de Hanel et al. (2003).

La Figura 2.3 muestra dos contribuciones a la radiación saliente en la dirección μ (Ecuación 19): la radiación emitida en algún nivel de la atmósfera isoterma (T_A), que se extingue parcialmente, I_E , y la radiación emitida por la superficie a temperatura T_S , que tras atravesar un espesor óptico τ_λ ha padecido una extinción como la de la Ecuación 10, I_D . En este ejemplo, si $T_S > T_A$ la banda espectral estudiada se manifiesta en absorción, mientras que si $T_A > T_S$ lo hará en emisión. Por último, si $T_A = T_S$, asumiendo que tanto la atmósfera como la superficie emiten como un cuerpo negro, la banda desaparece y queda únicamente el continuo: $B_\lambda(T_A)$.

$$I_\lambda(0, \mu) = I_E + I_D = B_\lambda(T_A)[1 - e^{-\tau_\lambda/\mu}] + B_\lambda(T_S)e^{-\tau_\lambda/\mu} \quad (19)$$

Se puede demostrar que para un espesor óptico lo suficientemente grande la banda satura cerca de su centro, donde dicha magnitud alcanza su máximo (Hanel et al., 2003). En esta situación la atmósfera se vuelve opaca, impidiendo ver la superficie. Como resultado, la intensidad deja de depender del contraste de las dos temperaturas y la parte central de la banda se aplanará según la emisión de cuerpo negro de la atmósfera $B_\lambda(T_A)$. Este fenómeno se ilustra en la Figura 4.10.

2.3.2. Atmósfera con gradiente de temperatura constante

Otro perfil T(P) de interés es el de un gradiente de temperatura constante ($\Gamma = -dT/dz = Cte$), que se puede emplear como aproximación realista en tramos reducidos de las atmósferas. En el problema físico considerado ahora T_A es la temperatura en la parte alta de la atmósfera, y entre esta región y la superficie habrá un gradiente vertical de temperatura constante, negativo si $T_S > T_A$ y positivo si $T_S < T_A$. En este caso el espectro es parecido, pero sin la propensión a saturar. Esto se debe a que el contraste de temperatura entre los diferentes niveles de la atmósfera es suficiente para que el espectro varíe cerca del núcleo de la banda, exista o no contribución de la superficie (Hanel et al., 2003). Además, las bandas de emisión y absorción no poseen el mismo área. Bajo las aproximaciones de equilibrio hidrostático y gas ideal, el efecto del descenso de la densidad de partículas con la altura es más rápido con un gradiente negativo de temperatura. En consecuencia, para una misma densidad de partículas en la base de la atmósfera, el área de la banda de absorción será mayor que la encerrada por la banda de emisión. Tal y como se ha definido el problema, la banda de emisión surge si $T_A > T_S$, siendo la contribución de los niveles cercanos a la superficie muy baja porque su temperatura sería cercana al mínimo T_S . No obstante, dicha región es la de mayor densidad y será importante en absorción, donde las alas de la banda serán más extensas y profundas que en el fenómeno de emisión. Todo ello se ilustra en la Figura 2.4.

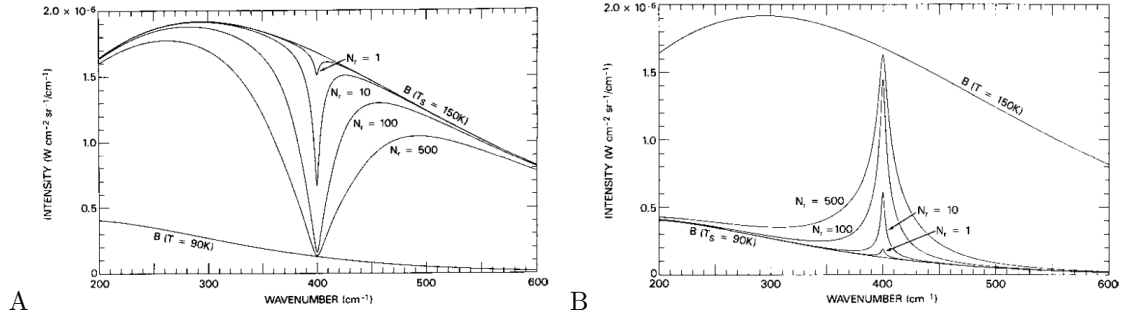


Figura 2.4: A la hora de calcular la banda de absorción (A) y la banda de emisión (B) se han hecho los mismos supuestos, que no ocupan nuestra atención. En su lugar, se puede ver que las bandas no aparecen saturadas y que el área de la banda de absorción es mayor ante una misma densidad de partículas en el nivel de base, N_r . Imágenes tomadas de Hanel et al. (2003).

2.3.3. Atmósfera con gradiente de temperatura variable

Por último, en el caso más general de un gradiente variable, resulta imprescindible explorar la denominada función de contribución por su gran correlación con el espectro observado. El máximo de la función, $C(z, \mu)$, indica el nivel vertical de la atmósfera que más contribuye a la intensidad emitida total (Hanel et al., 2003):

$$C(z, \mu) = B(z)W(z, \mu) \quad (20)$$

siendo $B(z)$ la emisión de cuerpo negro en el nivel vertical correspondiente y $W(z, \mu)$ la función de ponderación

$$W(z, \mu) = \frac{\partial}{\partial z} \left[\exp \left(-\frac{1}{\mu} \int_z^{z_0} NT_\lambda dz' \right) \right] \quad (21)$$

Como se ha definido en la Sección 2.1, μ dará cuenta de la dirección de observación, N es la densidad de partículas y z_0 la altura de la parte superior de la atmósfera. La función en la Ecuación 21 no es más que el gradiente vertical de la transmitancia de la atmósfera en la dirección μ , y será máxima allí donde la transmitancia varíe más rápido (Hanel et al., 2003). Atendiendo a la Ecuación 20, tanto la radiación de cuerpo negro $B(z)$ como la transmitancia T_λ dependen de la longitud de onda, así que el nivel efectivo de emisión en la atmósfera también. Dado que la temperatura varía con la altura, la intensidad emitida en cada λ (o ν) estará estrechamente ligada a la temperatura del nivel efectivo de emisión. Esta es la idea principal de la Sección 2.3.

La primera consecuencia es que observando el espectro de emisión de un planeta puede inferirse el perfil vertical de temperatura si se conoce $W(z, \mu)$. Por ejemplo, si aumenta la opacidad de la atmósfera en una determinada región espectral⁴ ν_0 , el nivel efectivo de emisión de la atmósfera se eleva para ese valor de ν . Por lo tanto, para inferir el perfil $T(P)$ a partir de una banda del espectro térmico es razonable considerar los ν_i en los máximos y mínimos (absolutos y locales) de intensidad y en el continuo; así, se abarca una extensión vertical de la atmósfera lo más amplia posible. La máxima transparencia de la atmósfera se tendrá en el continuo, donde contribuyen las capas atmosféricas más profundas accesibles, mientras que el centro de la banda es la región espectral de opacidad máxima, y por tanto donde se captan los fotones provenientes de las capas más altas de la atmósfera.

En general, un máximo en la radiancia espectral estará vinculado a la temperatura máxima de la atmósfera, T_{max} . No obstante, para un determinado valor de ν , como la función de contribución es dependiente de la altura puede ocurrir que varias capas atmosféricas contribuyan significativamente

⁴En el resto de la sección se tomará ν en lugar de λ

a la intensidad emitida si $C(z, \mu)$ es lo suficientemente amplia. Entonces, el máximo de intensidad no corresponderá a $B_\nu(T_{max})$ sino a un valor más moderado, amortiguado en consonancia con la emisión de las capas contiguas. Por otro lado, el mínimo de radiancia es aún más escurridizo: el máximo de la función de ponderación $W(z, \mu)$ apuntaría en este caso a la capa atmosférica donde la temperatura es mínima, pero en ella $B_\nu(T_{min})$ será mínima por definición, así que el producto de la Ecuación 20 da lugar a una función de contribución de dos modos amplios. En este escenario, la amplia extensión atmosférica contribuyente provoca que deje de tener sentido hablar de un nivel efectivo de emisión (Hanel et al., 2003). Dicho de otra forma, inferir el mínimo de temperatura del perfil $T(P)$ a partir de observaciones de carácter remoto puede ser una ardua tarea, si no una misión imposible.

La segunda consecuencia es que el problema inverso de *retrieval* del perfil $T(P)$ es extremadamente sensible a la resolución espectral y al ruido aleatorio. En base a lo expuesto, la resolución vertical y el rango de alturas en el que se podrá obtener el $T(P)$ está supeditado a una resolución espectral que abarque suficientemente las emisiones de diversos niveles efectivos. Al mismo tiempo, los errores aleatorios en el espectro poseen una fuerte influencia sobre las incertidumbres en el perfil de temperatura inferido (Hanel et al., 2003).

2.4. Problema inverso: Retrieval

En física es habitual realizar predicciones a partir de la inserción de unas condiciones iniciales (*C.I.*) en un modelo que describa plenamente un sistema físico determinado. Esto se conoce como problema directo (*forward problem*). No obstante, cabe la posibilidad de revertir el proceso y resolver el problema inverso (*inverse problem*): partiendo de unas observaciones (o medidas) se pueden inferir los valores que deben tomar los parámetros de dicho modelo para dar lugar al comportamiento advertido del sistema físico (Tarantola, 2005). Inmediatamente se deduce que mientras que el problema directo en general tiene solución única, el problema inverso está afectado por la degeneración. Como ejemplo, imaginemos la ecuación de estado de un gas ideal $PV = nRT$. Si experimentalmente se conoce que $PV = 10$, existirán infinitas combinaciones de P y V para dar lugar a ese valor. A pesar de que en problemas inversos con más de un parámetro la aparición de la degeneración sea algo inevitable, el objetivo es acotar los valores de los parámetros lo máximo posible hasta dar con la solución óptima. Además, es evidente que en la solución del problema inverso la incertidumbre de cada parámetro va a ser tan importante como el valor inferido.

Sea un conjunto de observaciones $R_0(\lambda)$, donde el número de medidas es N , y un modelo multiparamétrico que describe el sistema físico estudiado $R(\lambda, g_1, g_2, g_3, \dots)$, el ajuste del modelo a las observaciones se examina por medio de la desviación cuadrática media (o χ^2):

$$\chi^2 = \frac{1}{\eta} \sum_{\lambda_0}^{\lambda_N} \frac{[R_0(\lambda) - R(\lambda, g_1, g_2, g_3, \dots)]^2}{\sigma_\lambda^2} \quad (22)$$

donde σ es la desviación estándar⁵ y η los grados de libertad del sistema, que si únicamente se impone la ligadura de las observaciones, sin ninguna otra restricción para los parámetros, será $\eta = N - 1$ (Bevington and Robinson, 2003). En el caso de incorporar η , el factor de interés se denomina ' χ^2 reducido', que es el que se ha empleado durante el trabajo al referirnos a χ^2 . Por la propia definición de la Ecuación 22, el factor χ^2 tomaría el valor 0 si el modelo diese lugar exactamente a los valores observados, lo cual es altamente improbable porque en cualquier experimento real existen fuentes de error. Se dirá que se tiene un buen ajuste, o correlación, si $\chi^2 \lesssim 1$. Equivalentemente, cuanto mayor sea dicha magnitud peor será la correlación, así que el objetivo es minimizar el factor χ^2 . Actualmente, existen muchos códigos de computación diseñados para minimizar funciones. Como se va a ver más adelante, en este proyecto se ha querido hacer uso de alguno de ellos, para lo cual la salida de las funciones de Python que se pretendan minimizar debe ser únicamente χ^2 .

⁵En este proyecto se ha tomado como el 5% del flujo observado en cada punto

Si el modelo tiene m parámetros de ajuste⁶ cuyo valor se desea hallar, la función χ^2 se puede derivar con respecto a cada uno de los parámetros e igualar a 0 para obtener un sistema de m ecuaciones con m incógnitas:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial g_i} = 0 \quad ; \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (23)$$

Como puede verse, el número de parámetros impone las evaluaciones del modelo necesarias, que son del orden de N^m (Bevington and Robinson, 2003). Por consiguiente, el coste computacional crece exponencialmente con el número de dimensiones del problema, así que conviene reducir esta variable tanto como sea factible. Para ello, la estrategia ideal es la que permita adquirir un buen conocimiento ‘a priori’ del sistema. En primer lugar, los fundamentos teóricos conducen a descartar valores de los parámetros cuyo modelo asociado no tenga significado físico, lo que se conoce como imponer una restricción a los parámetros. Además, también puede ser útil encontrar ligaduras entre ellos. En segundo lugar, si es posible conviene evaluar por separado la influencia de cada parámetro en el ajuste, lo que otorga dos ventajas: por un lado, se adquiere una idea previa del valor óptimo de los parámetros g_i en ajustes unidimensionales (no degenerados), aunque si hay degeneración estos valores no tienen por qué asemejarse a la realidad en el espacio m dimensional; por otro, se es capaz de detectar la falta de sensibilidad del modelo a alguno de los parámetros que se estaban usando, y así suprimirlo del ajuste. A estas alturas, se habrán reducido tantas dimensiones como sea posible. Por último, los parámetros pueden estar fuertemente acoplados y dificultar la obtención de la solución óptima, así que habría que explorar las segundas derivadas. Dos parámetros g_1 y g_2 estarán tanto más acoplados cuanto mayor sea el valor de la derivada cruzada $\partial^2 \chi^2 / \partial g_1 \partial g_2$.

Ideas fundamentales de los métodos de minimización de χ^2 utilizados

Uno de los dos métodos utilizados para minimizar funciones, más concretamente el factor χ^2 de salida, es el método *simplex* de Nelder and Mead (1965). El *simplex* es una hipersuperficie en el espacio de parámetros m dimensional delimitada por $m + 1$ puntos o vértices. Los puntos del hiperespacio tienen m coordenadas⁷, y cada uno constituye una de las posibles combinaciones de valores para los parámetros del modelo. En cada paso del algoritmo, el vértice del *simplex* que da lugar al mayor valor de la función se reevalúa: el *simplex* se expande o se contrae entorno a la imagen de dicho vértice con respecto al punto medio del resto de vértices. Así, se decide cómo ha de moverse dicho vértice en favor de la búsqueda del punto del hiperespacio que minimiza la función (Figura 3.12). Al final del proceso, idealmente, los vértices acaban convergiendo a una misma región espacial, devolviendo un vector con la combinación de valores de los parámetros que propician el mejor ajuste del modelo a las observaciones. Cabe destacar que el método de Nelder-Mead no emplea derivadas de la función.

El método de *retrieval* por el que apuesta el PSG es el *optimal estimation method* (Rodgers, 2000). Para resolver el problema inverso, éste se basa en los métodos de inferencia bayesiana: posee una estructura que permite introducir la estimación ‘a priori’ de los parámetros de ajuste, \vec{x}_a , además de los errores asumidos para los mismos, que se incorporan en una matriz de covarianza S_a . A partir de un conjunto de observaciones \vec{y} , sus varianzas S_y y el modelo directo $\vec{F}(\vec{x})$ para cada vector de estado \vec{x} , el método minimiza χ^2 iterando de la siguiente forma⁸ (ODell, 2014):

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + S_i [K_i^T S_y^{-1} (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_i)) + \gamma S_a^{-1} (\vec{x}_a - \vec{x}_i)] \quad (24)$$

donde K_i es la matriz jacobiana que contiene la información de la sensibilidad del modelo a cada parámetro de entrada

$$K_i = K(\vec{x}_i) = \frac{\partial \vec{F}(\vec{x}_i)}{\partial \vec{x}} \quad (25)$$

⁶Indistintamente, se puede decir que es un modelo de m dimensiones

⁷Por este motivo, en el contexto de la computación se les trata y alude por vectores

⁸Las matrices traspuestas se distinguen con el superíndice T y las inversas con -1

y ésta sirve para calcular S_i , la matriz que permite extraer las incertidumbres del vector de estado solución:

$$S_i = (K_i^T S_y^{-1} K_i + S_a^{-1})^{-1} \quad (26)$$

A pesar de todas las ventajas de este método, entre las que se incluyen poder introducir valores ‘a priori’ y realizar el seguimiento de los errores que después permite inferir el vector de estado junto con sus incertidumbres, no está exento de algunos inconvenientes: la convergencia no está garantizada y puede ser lento en modelos no lineales como el requerido para estudiar el RT. No obstante, el PSG incluye un parámetro adicional γ (incluido en la Ecuación 24) que permite restringir el proceso al entorno de los valores ‘a priori’ (Sección 3.1) y así acelerar el proceso de convergencia.

3 Método experimental

Partiendo de un espectro observado se pretende inferir los parámetros atmosféricos implicados; para ello, se empleará un modelo atmosférico inicial y se buscará la convergencia entre observaciones y modelo variando los parámetros que definen éste último. Para resolver cada problema inverso planteado, el primer paso es precisar los parámetros más relevantes del modelo por medio de una discusión teórica del problema. Después, se acude a la interfaz web de PSG para generar una plantilla atmosférica aproximada capaz de reproducir el espectro de interés¹. Este modelo atmosférico inicial, y su posterior manipulación, servirá para inicializar el *retrieval* de los parámetros, para lo que se cuenta con dos métodos: una función externa que se ejecuta localmente realizando llamadas al servidor remoto de PSG, y la propia herramienta de *retrieval* del PSG, que por lo tanto se ejecuta completamente en remoto. En este proyecto, se han utilizado los modelos iniciales para generar con PSG espectros sintéticos que simulen las observaciones. Este método nos permite asegurar la igualdad de otras condiciones, así como conocer el valor correcto que reproduce las observaciones sintéticas a la perfección. Por último, centrando la atención sobre diversos casos de interés, con los espectros observados y las condiciones iniciales incorporadas en los modelos, se lanzarán los *retrievals* para inferir los parámetros atmosféricos relevantes con mayor precisión. Este último paso irá acompañado del análisis de los resultados obtenidos y sus implicaciones.

El método experimental seguido en este proyecto reposa sobre dos pilares fundamentales: La herramienta de *retrieval* del Planetary Spectrum Generator (PSG) y el código escrito en Python para exprimir el PSG hasta obtener su máximo rendimiento. Entre tanto, por medio de un ejemplo bien conocido (Munguira, 2019), en la Sección 3.3 se explorará la eficiencia de la herramienta de *retrieval* del PSG, contrastándola con la inferencia de parámetros por el método local.

3.1. Planetary Spectrum Generator

Planetary Spectrum Generator es una herramienta *online* de Goddard Space Flight Center (GSFC, NASA) capaz de generar espectros planetarios en un amplio rango de longitudes de onda: desde 100 nm hasta 100 mm (Villanueva et al., 2018). Para ello, el PSG utiliza códigos de transporte radiativo junto con bases de datos planetarias y espectroscópicas. La inicialización se realiza por medio de un fichero de configuración en formato XML. El formato XML (de eXtensible Markup Language)² es un metalenguaje que permite intercambiar datos mediante la creación de etiquetas. Ha sido desarrollado por el World Wide Web Consortium (W3C) y se ha convertido en un estándar de fácil manipulación desde muchos lenguajes de programación modernos, como Python. El fichero recoge los parámetros necesarios para definir el problema, agrupados en tres campos: ‘Objeto y Geometría’, ‘Atmósfera y Superficie’ y ‘Parámetros del instrumento’ (Figura 3.1). Una de las ventajas del fichero XML es que se puede construir interactivamente a través de la plataforma web del PSG, así como usando diversas plantillas que exploran una gran variedad de casos (tanto en términos de objetos como de instrumentos).

En ‘Objeto y Geometría’, entre otras cosas, se selecciona el astro de interés, amén de la geometría del problema, la región de observación y el observatorio, bien sea terrestre, espacial, un orbitador o un *lander*. Esto permite desde variar la inclinación axial de un planeta hasta simular la detección *in-situ* de polvo en Marte desde el instrumento de un *rover*. En planetas cuyas bases de datos son extensas, como son el caso de la Tierra o Marte, al variar la fecha y/o región de observación se carga el correspondiente estado meteorológico (presión atmosférica, temperatura superficial, perfil vertical de temperatura, presencia de nubes y aerosoles, albedo,...) precalculado a partir de modelos de circulación global. Para finalizar, cabe destacar que la interfaz web del PSG simula la vista del astro y su iluminación desde cuatro perspectivas (Figura 3.2): desde el Sol, desde el observador, y la proyección polar centrada en ambos polos.

‘Atmósfera y Superficie’ constituye el eje central de nuestros problemas de *retrieval*, dado que define las propiedades de la atmósfera del astro. No sólo es vital comprender todos los parámetros, y de alguna forma todas las posibilidades ofrecidas, sino sus nombres y los de sus unidades en

¹En algunos casos, el usuario se topará con limitaciones intrínsecas del PSG a la hora de reproducir un fenómeno concreto, por ejemplo la variación del ratio de hidrógeno orto/para en Júpiter

²<https://www.w3.org/XML/>

```

Objeto y Geometria
<OBJECT>Jupiter
<OBJECT-NAME>Jupiter
<OBJECT-DATE>2018/09/15 12:54
<OBJECT-DIAMETER>139822
<OBJECT-GRAVITY>24.8
<OBJECT-GRAVITY-UNIT>g
<OBJECT-STAR-DISTANCE>5.2
<OBJECT-STAR-VELOCITY>0.0
<OBJECT-SOLAR-LONGITUDE>0.0
<OBJECT-SOLAR-LATITUDE>0.0
<OBJECT-SEASON>0.00
<OBJECT-STAR-TYPE>
<OBJECT-STAR-TEMPERATURE>5778
<OBJECT-STAR-RADIUS>1.00
<OBJECT-OBS-LONGITUDE>0.00
<OBJECT-OBS-LATITUDE>0.00
<OBJECT-OBS-VELOCITY>0.0
<OBJECT-PERIOD>0.41345
<OBJECT-PERAPSS>0.00
<OBJECT-ECCENTRICITY>0.00000
<OBJECT-INCLINATION>90.00
<GEOMETRY-Observatory
<GEOMETRY-OFFSET-NS>0.0
<GEOMETRY-OFFSET-EW>0.0
<GEOMETRY-OFFSET-UNIT>arcsec
<GEOMETRY-OBS-ALTITUDE>5.2
<GEOMETRY-ALTITUDE-UNIT>AU
<GEOMETRY-USER-PARAM>0.0
<GEOMETRY-STAR-TYPE>G
<GEOMETRY-STELLAR-TEMPERATURE>5777
<GEOMETRY-STELLAR-MAGNITUDE>0
<GEOMETRY-SOLAR-ANGLE>48.114
<GEOMETRY-OBS-ANGLE>48.114
<GEOMETRY-PLANET-FRACTION>9.999e-01
<GEOMETRY-STAR-DISTANCE>-1.000000e+00
<GEOMETRY-STAR-FRACTION>0.000000e+00
<GEOMETRY-PHASE>0.000
<GEOMETRY-REF>User
<GEOMETRY-DISK-ANGLES>1
<GEOMETRY-NOTATIONS>0.00.8.69
<GEOMETRY-AZIMUTH>0.000

Atmósfera y Superficie
<ATMOSPHERE-DESCRIPTION>Jupiter atmosphere - Moses et al. 2005, IGR
<ATMOSPHERE-STRUCTURE>Equilibrium
<ATMOSPHERE-WEIGHT>2.6
<ATMOSPHERE-PRESSURE>10
<ATMOSPHERE-PUNIT>bar
<ATMOSPHERE-NGAS>8
<ATMOSPHERE-GAS>H2,H2O,NH3,CH4,C2H6,C2H2,C2H4
<ATMOSPHERE-TYPE>HIT[45],HIT[0],HIT[1],HIT[11],EXO[CH4],HIT[27],HIT[26],HIT[38]
<ATMOSPHERE-ABUN>100,15.7,1.1,1.1,1.1,1.1
<ATMOSPHERE-UNIT>pcct,pccl,sccl,scsl,scsl,scsl
<ATMOSPHERE-NAERO>4
<ATMOSPHERE-AEROS-AMMONIA,Waterice,Haze,Cloud
<ATMOSPHERE-ATYPE>Ice_Martonchik_GSFC[0.19-200.00um],WARRREN_ICE_HRI[0.04um 2.00um],RAMIREZ_TITAN_AEROSOL_HRI[0.20-1.00um],White_GSFC[0.10-100000.04um]
<ATMOSPHERE-ABUN1>1,1,1,1
<ATMOSPHERE-AUNIT>sccl,scsl,scsl
<ATMOSPHERE-ASIZE>10,10,0,0,3,1
<ATMOSPHERE-LAYERS-MOLECULES>Cloud,Haze,Ammonia,C2H2,C2H4,C2H6,CH4,H2O,NH3,Waterice,NH4SH
<ATMOSPHERE-LAYERS>50
<ATMOSPHERE-LAYER-1>1.000E+01,3.400E+02,0.0,0.0,0.0,2.649E-13,1.286E-14,1.616E-09,1.998E-03,1.576E-03,8.089E-04,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-2>6.551E+00,3.054E+02,0.0,0.0,0.0,4.505E-13,2.141E-14,2.101E-09,1.981E-03,1.572E-03,8.071E-04,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-3>4.292E+02,2.710E+02,0.0,0.0,0.0,7.650E-13,5.965E-14,2.731E-09,1.985E-03,8.155E-04,8.093E-04,1.439E-02,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-4>2.812E+00,2.366E+02,0.0,0.0,0.0,1.303E-12,5.937E-14,3.550E-09,1.948E-03,4.287E-05,7.835E-04,8.447E-04,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-5>1.842E+00,2.092E+02,0.0,0.0,0.0,2.259E-12,9.885E-14,4.614E-09,1.931E-03,1.882E-06,7.395E-04,3.451E-05,3.438E-04
<ATMOSPHERE-LAYER-6>1.107E+01,1.862E+02,0.0,0.0,0.0,5.436E-12,1.646E-13,6.392E-09,1.915E-03,3.231E-08,7.321E-04,1.355E-06,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-7>7.906E-01,1.620E+02,0.0,0.0,0.0,5.412E-11,2.107E-11,2.741E-13,8.988E-09,1.899E-03,5.108E-16,7.200E-04,4.054E-08,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-8>5.179E-01,1.427E+02,1E-3,0.0,0.0,2.231E-11,4.563E-13,1.238E-08,1.883E-03,0.000E+00,4.185E-04,1.229E-09,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-9>3.893E-01,1.306E+02,0.0,1E-6,0.0,4.126E-11,7.598E-13,1.752E-08,1.867E-03,0.000E+00,1.401E-16,3.866E-11,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-10>2.223E-01,1.168E+02,0.0,1E-6,0.0,3.486E-10,1.529E-12,1.077E-07,1.851E-03,0.000E+00,0.000E+00,1.189E-12,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-11>1.456E-01,1.086E+02,0.0,1E-6,0.0,6.743E-10,3.229E-12,1.780E-07,1.835E-03,0.000E+00,0.000E+00,3.802E-14,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-12>9.541E-02,1.105E+02,0.0,0.0,0.0,1.153E-09,6.821E-12,2.942E-07,1.820E-03,0.000E+00,0.000E+00,1.331E-15,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-13>6.211E-02,1.231E+02,0.0,0.0,0.0,1.923E-09,1.441E-11,4.851E-07,1.793E-03,0.000E+00,0.000E+00,5.098E-17,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-14>4.095E-02,1.306E+02,0.0,0.0,0.0,3.031E-09,3.044E-11,8.033E-07,1.764E-03,0.000E+00,0.000E+00,1.860E-18,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-15>2.683E-02,1.381E+02,0.0,0.0,0.0,4.779E-09,5.243E-11,1.242E-06,1.735E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-16>1.758E-02,1.427E+02,0.0,0.0,0.0,7.535E-09,8.520E-11,1.612E-06,1.706E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-17>1.151E-02,1.467E+02,0.0,0.0,0.0,1.188E-08,1.385E-10,2.092E-06,1.678E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-18>7.543E-03,1.513E+02,0.0,0.0,0.0,1.919E-08,2.250E-10,2.715E-06,1.650E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-19>4.942E-03,1.563E+02,0.0,0.0,0.0,3.118E-08,3.657E-10,3.521E-06,1.623E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-20>3.227E-03,1.603E+02,0.0,0.0,0.0,5.066E-08,5.610E-10,4.498E-06,1.597E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-21>2.121E-03,1.633E+02,0.0,0.0,0.0,8.230E-08,8.140E-10,5.370E-06,1.570E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-22>1.389E-03,1.646E+02,0.0,0.0,0.0,1.322E-07,1.181E-09,6.632E-06,1.545E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-23>9.047E-04,1.646E+02,0.0,0.0,0.0,2.187E-07,1.714E-09,8.190E-06,1.533E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-24>5.964E-04,1.646E+02,0.0,0.0,0.0,2.524E-07,2.487E-09,1.011E-05,1.447E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-25>3.907E-04,1.646E+02,0.0,0.0,0.0,4.488E-07,3.428E-09,1.135E-05,1.394E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-26>2.560E-04,1.646E+02,0.0,0.0,0.0,8.212E-07,4.017E-09,1.232E-05,1.342E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-27>1.677E-04,1.646E+02,0.0,0.0,0.0,6.357E-07,4.708E-09,1.337E-05,1.292E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-28>1.099E-04,1.646E+02,0.0,0.0,0.0,7.608E-07,5.517E-09,1.451E-05,1.245E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-29>7.197E-05,1.647E+02,0.0,0.0,0.0,9.106E-07,5.995E-09,1.574E-05,1.198E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-30>4.715E-05,1.651E+02,0.0,0.0,0.0,1.109E-06,5.995E-09,1.789E-05,1.154E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-31>3.089E-05,1.655E+02,0.0,0.0,0.0,1.305E-06,6.419E-09,1.803E-05,1.111E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-32>2.024E-05,1.660E+02,0.0,0.0,0.0,1.575E-06,7.426E-09,1.845E-05,1.053E-03,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-33>1.326E-05,1.664E+02,0.0,0.0,0.0,1.915E-06,1.114E-08,1.887E-05,9.806E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-34>8.685E-06,1.676E+02,0.0,0.0,0.0,2.327E-06,2.130E-08,1.931E-05,9.129E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-35>5.690E-06,1.690E+02,0.0,0.0,0.0,2.829E-06,6.909E-08,1.975E-05,8.498E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-36>3.728E-06,1.703E+02,0.0,0.0,0.0,3.438E-06,2.241E-07,2.020E-05,7.911E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-37>2.442E-06,1.734E+02,0.0,0.0,0.0,3.996E-06,7.288E-07,2.067E-05,6.802E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-38>1.600E-06,1.776E+02,0.0,0.0,0.0,4.252E-06,1.283E-06,2.114E-05,5.651E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-39>1.048E-06,1.837E+02,0.0,0.0,0.0,4.525E-06,2.138E-06,1.954E-05,4.694E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-40>6.866E-07,1.734E+02,0.0,0.0,0.0,3.996E-06,7.288E-07,2.067E-05,6.802E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-41>4.498E-07,2.119E+02,0.0,0.0,0.0,3.539E-06,3.300E-06,1.106E-05,3.240E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-42>2.947E-07,2.451E+02,0.0,0.0,0.0,2.724E-06,2.077E-06,6.632E-06,2.414E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-43>1.931E-07,2.929E+02,0.0,0.0,0.0,8.531E-07,4.782E-07,1.263E-06,1.092E-04,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-44>1.265E-07,3.631E+02,0.0,0.0,0.0,3.096E-08,1.036E-07,2.201E-07,3.956E-05,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-45>8.286E-08,4.400E+02,0.0,0.0,0.0,6.757E-09,2.477E-09,7.675E-09,7.985E-06,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-46>5.429E-08,4.867E+02,0.0,0.0,0.0,1.081E-10,4.905E-11,2.332E-10,7.380E-07,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-47>3.556E-08,4.881E+02,0.0,0.0,0.0,1.728E-12,9.714E-13,1.669E-12,6.250E-08,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-48>2.330E-08,4.895E+02,0.0,0.0,0.0,4.686E-14,3.038E-14,1.043E-14,5.293E-09,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-49>1.526E-08,4.910E+02,0.0,0.0,0.0,1.398E-15,1.203E-15,6.520E-17,4.482E-10,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-LAYER-50>1.000E-08,4.922E+02,0.0,0.0,0.0,4.170E-17,4.762E-17,4.075E-19,3.501E-11,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00,0.000E+00
<ATMOSPHERE-TEMPERATURE>210
<ATMOSPHERE-TAU>.....
<ATMOSPHERE-LMAX>0
<ATMOSPHERE-ASUN1>um,um,um,um
<SURFACE-TEMPERATURE>340
<SURFACE-ALBEDO>0.343
<SURFACE-EMISSIVITY>0.657
<SURFACE-GAS-RATIO>1.0
<SURFACE-NSURF>0
<SURFACE-PHASE>G-0
<SURFACE-GAS-UNIT>ratio

Parámetros del instrumento
<GENERATOR-BEAM>1
<GENERATOR-BEAM-UNIT>diameter
<GENERATOR-GAS-MODEL>Y
<GENERATOR-CONT-MODEL>Y
<GENERATOR-RANGE1>0-3
<GENERATOR-RANGE2>1.063
<GENERATOR-RANGEUNIT>um
<GENERATOR-RESOLUTION>0.01
<GENERATOR-RESOLUTIONUNIT>um
<GENERATOR-RADIUNITS>Wmm2um
<GENERATOR-DIAMTELE>6.5
<GENERATOR-LOGRADN>
<GENERATOR-CONT-STELLAR>Y
<GENERATOR-TRANS-APPLY>N
<GENERATOR-TRANS-SHOW>N
<GENERATOR-TRANS-O2>01
<GENERATOR-NOISE>0
<GENERATOR-NOISEZ>1
<GENERATOR-NOISETIME>0.2
<GENERATOR-NOISEOTEMP>300
<GENERATOR-NOISEOFF>1
<GENERATOR-NOISEDEMS>1
<GENERATOR-NOISEFRAMES>4000
<GENERATOR-NOISEPIXELS>1
<GENERATOR-NOISE>1
<GENERATOR-TELESCOPE>SINGLE
<GENERATOR-TELESCOPE1>1
<GENERATOR-TELESCOPE2>0.0
<GENERATOR-TELESCOPE3>1.0
<GENERATOR-INSTRUMENT>user

```

Figura 3.1: Ejemplo de fichero de configuración del PSG en formato XML.

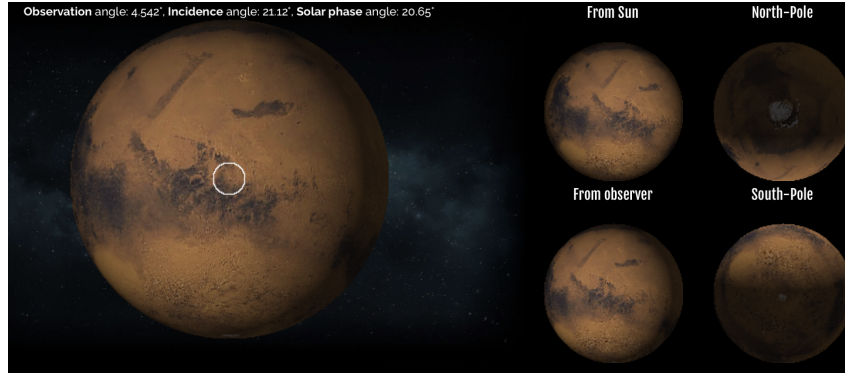


Figura 3.2: Captura de pantalla de una simulación de observación de Marte en PSG.

el fichero de configuración. Este área define parámetros tales como la temperatura y presión en superficie, el perfil vertical de temperatura $T(z)$, los aerosoles y su tamaño de partículas o la distribución vertical de los compuestos, $N(z)$. La abundancia de gases y aerosoles se da en ratio de mezcla en volumen (*v.m.r.*, por sus siglas en inglés). No obstante, los perfiles verticales no pueden ser editados en la interfaz web, por lo que es necesario recurrir a una edición local e implementarlos en PSG a través de una plantilla. Por otra parte, a partir de las bases de datos planetarias, si se elige ‘scaler’³ como unidades de abundancia, es posible variar dicha magnitud de un compuesto tan solo multiplicando su $N(z)$ por el factor de escala correspondiente. Así, se asume que la forma de la distribución vertical del compuesto está correctamente definida en PSG, al mismo tiempo que se toma la licencia de ajustar su abundancia total en el modelo.

Por su parte, el área ‘Parámetros del instrumento’ es donde se especifican el rango de frecuencias o longitudes de onda, la resolución espectral requerida, las unidades de la intensidad recogida en el espectro y el ruido en la detección. Además, es posible seleccionar telescopios e instrumentos que están actualmente en funcionamiento, como HST/WFC3; futuros telescopios espaciales para la observación de exoplanetas, como ARIEL, o instrumentos de detección a bordo de un orbitador, como es el caso del espectrógrafo NOMAD-LNO de la misión ExoMars TGO. PSG incluye también los instrumentos de la misión James Webb Space Telescope (JWST), lo que lo convierte en una herramienta muy útil para analizar las próximas capacidades que aportará este futuro observatorio espacial.

PSG en el problema inverso

La herramienta de *retrieval* del PSG está basada en el denominado *optimal estimation method* (Rodgers, 2000) introducido en la Sección 2.4. Al igual que se realiza la edición de un fichero de configuración del PSG para variar los parámetros del astro observable, es posible introducir información adicional para llamar a la herramienta de *retrieval* del PSG. Esta se añade al final del fichero de configuración usual y consta de parámetros de tipo *retrieval*⁴ y un conjunto de datos observacionales. Por un lado, dichos datos deben escribirse por columnas: λ , R_λ y opcionalmente la incertidumbre en el flujo, ΔR_λ , cuya ausencia el PSG solventa asumiendo un 5% del flujo; por otro, se debe indicar los parámetros del modelo que se van a ajustar con las observaciones, su estimación p_0 (no necesariamente precisa) para inicializar el proceso de *retrieval* y los límites superior p_{max} e inferior p_{min} . Con los últimos se determina la varianza de cada parámetro:

$$\sigma_p = \frac{p_{max} - p_{min}}{10} \quad (27)$$

Además, las matrices jacobianas se computarán en saltos sucesivos correspondientes al 0.1% del valor máximo (p_{max}) introducido, con lo que se debe tener presente la importancia de dicha elección. Con la salvedad de tener que definir apropiadamente las unidades espectrales y la resolución de

³Nombre de estas unidades en el fichero de configuración: *scl*

⁴<https://psg.gsfc.nasa.gov/helpapi.php#parameters>

los datos observacionales, el último parámetro de entrada clave para el *retrieval* es el denominado parámetro de Levenberg-Marquardt, en adelante γ ; valores altos ($\gamma = 10$) favorecerán un buen ‘a priori’ restringiendo el proceso alrededor del valor inicial (p_0), valores próximos a 0 inicializarán el método clásico de Levenberg-Marquardt y si $\gamma = 1$ se emplea el formalismo clásico de Rodgers. Con todo ello en el nuevo fichero de configuración, y mediante una clave especial, puede lanzarse a través de la API el ajuste del modelo a los datos observacionales provistos. Esto permitirá inferir los valores que deben tomar los parámetros atmosféricos seleccionados para que el modelo case con dichas observaciones.

3.2. Implementación de API desde Python

La interfaz web del PSG se encarga de escribir el fichero de configuración según las elecciones del usuario. Por tanto, al ser esa su única función, es prescindible si se diseña otra vía para llevar a cabo la edición de dicho fichero. En este proyecto, se ha apostado por escribir un código en Python⁵ para abarcar y flexibilizar el análisis del problema inverso en la medida de lo posible. El código se ha estructurado por bloques, con la intención de que sean extensibles al estudio de cualquier problema.

La comunicación con la API del PSG se materializa a través de la librería *subprocess* de Python, que permite lanzar una línea de comando en la terminal del ordenador local y capturar la salida. La Figura 3.3 muestra las líneas básicas de código necesarias para generar un espectro en PSG desde Python, a partir del fichero de configuración (por ejemplo ‘Jupiter_reflejado.txt’) que contiene los parámetros del problema. Los espacios de la tercera línea no deben ser omitidos, ya que es parte de la sintaxis indicada por el PSG. La quinta línea se ha insertado como abreviatura del comando requerido para guardar la salida, pero sería más conveniente almacenar ésta en un fichero de texto. En resumen, la API simplemente se ocupa de enviar un fichero XML de configuración (generado independientemente) al servidor de PSG, que es quien se encarga de ejecutarlo. Posteriormente, se recoge la salida del servidor remoto y se copia localmente para su manipulación.

```

1 import subprocess
2 config_file="Biblioteca/Jupiter_reflejado.txt"
3 curlUrl='curl --data-urlencode file@' + config_file + ' https://psg.gsfc.nasa.gov/api.php '
4 a=subprocess.run(curlUrl, capture_output=True, shell=True, text=True)
5 Salida_txt=a.stdout

```

Figura 3.3: Captura de la llamada a la API del PSG desde Python.

En este proyecto, se han realizado cuatro tipos de llamada a la API del PSG. La primera es la de la Figura 3.3, que devuelve el espectro con la información del flujo por longitud de onda o frecuencia. Las otras tres llamadas difieren únicamente en la tercera línea de la Figura 3.3 y se realizan con una clave introducida como un nuevo parámetro de línea de comando: *type*⁶. Por ejemplo, si se quiere obtener la computación de las transmitancias de todos los compuestos en una atmósfera, el código de RT emplea el mismo fichero de configuración, pero la tercera línea de la Figura 3.3 debería reescribirse como:

```

3 curlUrl='curl -d type=trn --data-urlencode file@' + config_file + ' https://psg.gsfc.nasa.gov/api.php'

```

Figura 3.4: Llamada a la API del PSG desde Python para calcular transmitancias.

Otra posibilidad, explicada en el enlace a pie de página, consiste en obtener un fichero de configuración partiendo únicamente del nombre del objeto y las efemérides. En este caso, no se ejecuta el paquete de RT del PSG, por lo que el procedimiento es ágil. Por último, la llamada al *retrieval* precisa un fichero de configuración como el explicado en la Sección 3.1 y la clave oculta ‘type=ret’. Esta clave se ha conseguido contactando personalmente al Dr. Villanueva, responsable de la herramienta PSG. La salida de esta última llamada incluye información variada. Por un lado se encuentran las líneas comunes a todos los ficheros de configuración, con la ventaja de que el ajuste de los parámetros está incluido, así que truncando el fichero de salida del problema inverso en el primer parámetro de tipo *retrieval* se recupera el modelo directo más próximo a la solución.

⁵Cuando se hable de llamadas al PSG siempre será a través de la API, salvo que se destaque lo contrario

⁶<https://psg.gsfc.nasa.gov/helpapi.php>

Aparte de esto, la salida también proporciona otro tipo de información como la incertidumbre de cada parámetro de interés, la correlación del modelo ajustado y las observaciones o un mensaje indicando si el *retrieval* ha finalizado con éxito.

Llamada a PSG a través de Docker

Con el fin de desahogar los servidores de la NASA, el PSG ofrece la posibilidad de realizar la llamada a la API de forma local a través de un repositorio de PSG en Docker (en este caso la tercera línea de la Figura 3.3 se sustituye por la de la Figura 3.5).

```
3 CurlUrl='curl --data-urlencode file@' + config_file + ' http://localhost:3000/api.php '
```

Figura 3.5: Llamada a la API del PSG desde Python a través de Docker.

Docker⁷ es una herramienta de virtualización que permite almacenar y compartir un código por paquetes. La principal ventaja de Docker frente a una máquina virtual es que de esta forma el código puede correrse simultáneamente desde multitud de configuraciones de *hardware*. Únicamente se requiere la instalación de la aplicación y seguir los pasos indicados en la web del PSG (pie de la página anterior). Una vez se accede al contenedor de PSG en Docker, la descarga de los paquetes que componen el código del PSG puede realizarse introduciendo en el navegador el url 'http://localhost:3000' (Figura 3.6); la ausencia de alguno de ellos puede producir una diferencia sustancial en el espectro obtenido por este método. Otra ventaja de usar Docker es saltarse el límite impuesto por el PSG de 1000 llamadas a la API por cliente y día. Los mayores inconvenientes, sin embargo, son la necesidad de descargar todo el contenido de la base de datos espectroscópica (13.6 GB para baja resolución y 135.6 GB para resolución media⁸) y la menor velocidad de los servidores locales frente a los potentes servidores de NASA/GSFC.

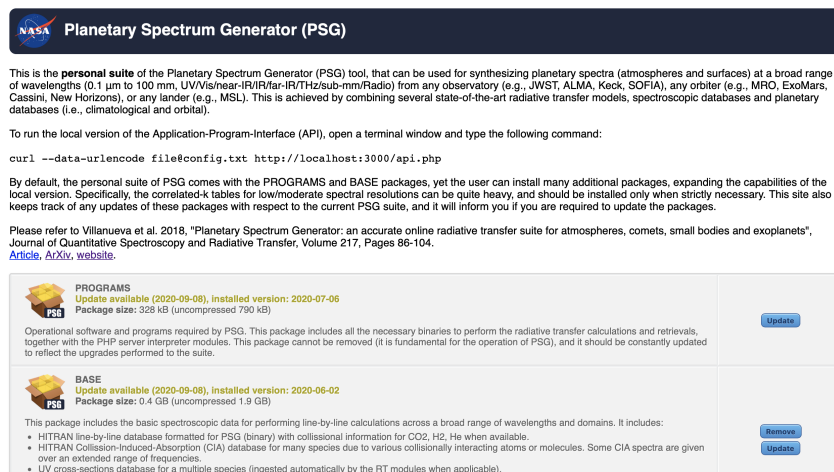


Figura 3.6: Captura de pantalla del aspecto de la interfaz web de PSG a través de Docker.

Tareas realizadas por el código

El código escrito en Python ha sido conferido de un gran número de funciones cuya misión es asistir el análisis de muy variados problemas físicos. Algunas tareas implementadas trabajarán sobre el fichero de configuración, sin llamar al PSG, evitando en la medida de lo posible realizar operaciones computacionalmente costosas. El modelo seguido es el de programación por bloques, es decir, cada función está escrita para una tarea concreta. La ventaja de este tipo de programación es doble: por un lado cada parte del código alcanza un mayor grado de especialización; por el otro, la adaptación del código a cualquier problema es más sencilla. A continuación se van a contextualizar

⁷ <https://docs.docker.com/get-started/overview/>

⁸ $500 < RP < 5000$

las capacidades del código mediante un ejemplo que arroja luz sobre lo que podría ser una versión pedagógica del código.

Imaginemos un usuario que desea analizar un problema atmosférico usando el programa aquí presentado. Se parte de un fichero de texto con la información acerca del espectro observado (rango espectral, flujo e incertidumbre) y la elección de un fichero de configuración adecuado de entre los modelos ya generados para distintos casos de interés, que han sido almacenados en un directorio que hace las veces de biblioteca. Entonces, el código posee funciones para editar el rango y la resolución espectral en el fichero de configuración, de tal forma que es capaz de hacer casar estas magnitudes entre modelo y observaciones. A fin de establecer una resolución espectral común para el modelo y las observaciones, asumiendo unidades de longitud de onda y N puntos, bastaría con leer tres puntos del fichero de datos observacionales ($\lambda_{min} = \lambda_1, \lambda_2$ y λ_N) si se opta por calcular la resolución del modelo de la siguiente manera:

$$R = \Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 \quad (28)$$

De esta forma, el modelo se lanza en el intervalo espectral que va desde $\lambda_{min} = \lambda_1$ hasta $\lambda_{max} = \lambda_N$ en saltos de $\Delta\lambda$. Una vez integrado el modelo al campo de acción, la espina dorsal del código está constituida por una estructura dividida en tres bloques (Figura 3.7). Se puede recurrir a estos bloques de forma simultánea o saltada, las flechas en la Figura 3.7 no excluyen otras formas posibles de ejecución en la columna principal.

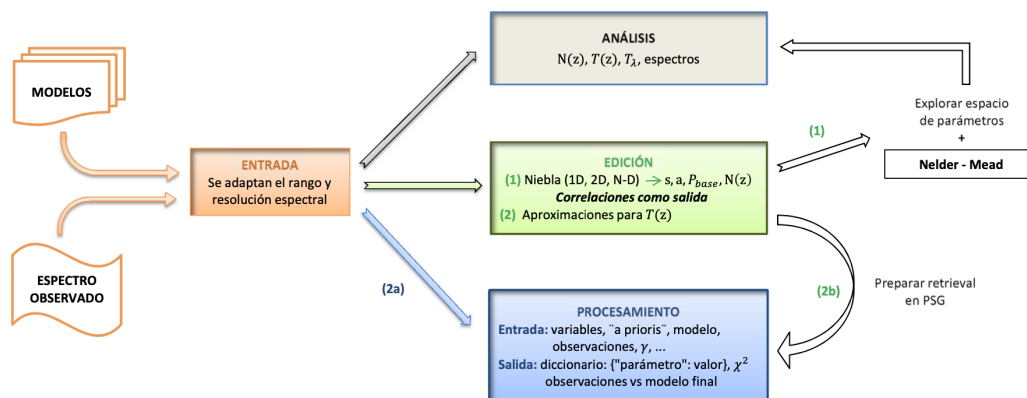


Figura 3.7: Esquema que aglutina las distintas partes del código escrito en Python.

El primer bloque (‘ANÁLISIS’) es el soporte para el análisis teórico de los modelos atmosféricos resultantes. Se ha implementado la capacidad para dibujar la distribución vertical de los compuestos de la atmósfera, $N(z)$, a partir del fichero de configuración (por ejemplo, Figura 3.9), es decir, sin necesidad de llamar a la API del PSG. Esto es de sumo interés, ya que el gráfico de $N(z)$ no se puede descargar directamente de la interfaz web y a su vez constituye una herramienta fundamental durante la monitorización del proceso y análisis de los resultados obtenidos. Lo mismo aplica al perfil vertical de temperatura (Ver Sección 4.2), $T(z)$, de sumo interés en la condensación de compuestos y en el espectro de emisión del planeta. Otra funcionalidad implementada para comprobar y analizar los resultados es la obtención y el posterior dibujo de la transmitancia de los compuestos (por ejemplo, Figura 3.10). En este caso, la llamada al código PUMAS del PSG es inevitable. Para ello, se usa el fichero de configuración estándar y una llamada especial a la API, como en la Figura 3.4. Para finalizar con el primer bloque, es posible graficar los espectros generados a través de la llamada al PSG y su correlación con las observaciones, como puede verse a lo largo del Capítulo 4.

El segundo bloque (‘EDICIÓN’) es el sustituto de la interfaz web del PSG y ha sido optimizado para ajustar dos atributos de las atmósferas planetarias: la presencia de nubes o aerosoles, con sus parámetros asociados, y el perfil vertical de temperatura. Para estudiar el primer caso, sería

necesario indicar a la entrada del código con cuántos parámetros se quiere ajustar la nube o niebla. La propia función para editar el fichero de configuración puede realizar la llamada al PSG para generar el espectro y dar como única salida la correlación de éste con el espectro observado. Como se explica en la Sección 2.4, esta condición es indispensable y suficiente para poder minimizar la función con respecto a los parámetros de ajuste, para lo que se ha elegido el método de Nelder-Mead. Alternativamente, esta estructura en la función permite explorar el espacio de parámetros. En contraste, la inferencia de la temperatura en cada nivel vertical de la atmósfera exige la irrupción de un método más sofisticado, como el *optimal estimation method* del PSG. Éste calcula los valores de los parámetros de ajuste junto con sus incertidumbres, lo que en el perfil $T(z)$ es fundamental a la hora de determinar la sensibilidad del espectro a la temperatura de los diferentes niveles. La capacidad de variar el perfil $T(z)$ es interesante a nivel teórico y como paso preliminar para inicializar el *retrieval* en PSG, tal y como se indica en la Figura 3.7. Cabe destacar que el método de Nelder-Mead para minimizar una función sólo es uno de los muchos que están disponibles en la librería ‘Scipy’ de Python. Otras librerías también cuentan con opciones que sirven a este propósito, e incluso se podría implementar un método de minimización desde cero.

El último bloque se denomina ‘PROCESAMIENTO’ y está exclusivamente dedicado al *retrieval* en PSG. Nuevamente, es necesario proveer a esta parte del código de algunos valores de entrada, que se insertan como parámetros de tipo *retrieval*⁹ en el fichero de configuración. La llamada al *retrieval* de PSG devuelve un mensaje acerca de la finalización del proceso (‘STATUS’), que se emplea para generar un mensaje de error (*AssertionError*) y detener el código si el proceso no ha sido exitoso. La salida de este bloque consiste en un diccionario de Python cuyas claves son los nombres de los parámetros en el fichero de PSG y tienen asociados los valores finales de dichos parámetros de ajuste con sus respectivas incertidumbres y unidades. También se devuelve la correlación del modelo resultante con las observaciones, tanto numérica como gráficamente, y el fichero de configuración de dicho modelo por si fuera de utilidad.

⁹La lista completa de parámetros de tipo *retrieval* se encuentra en la web del PSG, aunque no todos son imprescindibles. Los más importantes en nuestro código son los citados en la Sección 3.1

3.3. Resolución del problema inverso

Antes de aplicar el método experimental expuesto a diversos problemas físicos de las atmósferas, se va a evaluar su solvencia por medio de un escenario familiar: el espectro reflejado de Júpiter en el rango visible e infrarrojo cercano. Se parte del modelo atmosférico final que, con el PSG, se obtuvo en Munguira (2019), y que describe adecuadamente el transporte radiativo en el rango mencionado por medio de cuatro aerosoles: ‘WaterIce’, ‘Ammonia’, ‘Cloud’ y ‘Haze’. Tal y como se ha mencionado con anterioridad, generamos unas observaciones sintéticas correspondientes a esta configuración, asumiendo en el peor de los casos un ruido aleatorio del 5% y una incertidumbre (o barras de error) también del 5% (Figura 3.8).

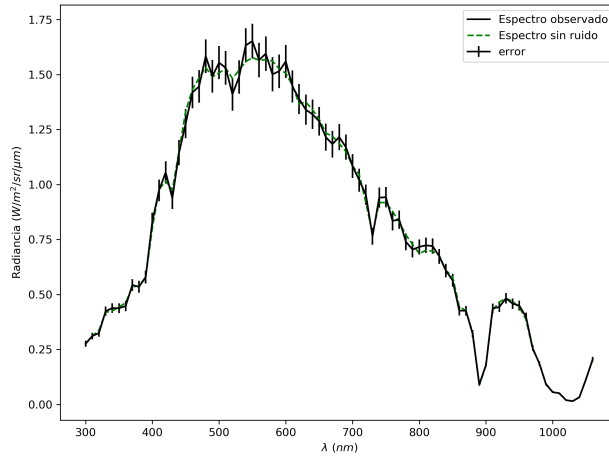


Figura 3.8: Espectro reflejado de Júpiter generado en PSG (verde). Se ha introducido un ruido aleatorio para conseguir un espectro observado sintético (negro).

Como se ha mencionado en la Sección 2.2, el espectro de la radiación reflejada por una atmósfera, rango visible e IR cercano, es altamente sensible a nubes y aerosoles. En la misma sección, se ha mencionado el rol de los gases, que predominan a lo largo de todo el IR. Para el caso que nos ocupa, en primera aproximación se va a considerar que por defecto los gases están bien definidos en el modelo de atmósfera de Júpiter desarrollado en PSG (Figura 3.9), ya que en la Figura 3.8 aparecen las fuertes bandas de absorción características del CH_4 y la de una micra del NH_3 . Estos espectros reproducen cualitativamente muy bien el observado por Karkoschka (1998), tal y como se discute en Munguira (2019). Esto nos permitirá centrar la atención en la descripción multiparamétrica de la niebla de Júpiter (‘Haze’), responsable de su tonalidad rojiza (West et al., 2004). La Figura 3.9 presenta la distribución vertical de todos los compuestos en el modelo de partida, con los dos ejes (presión y abundancia) en escala logarítmica.

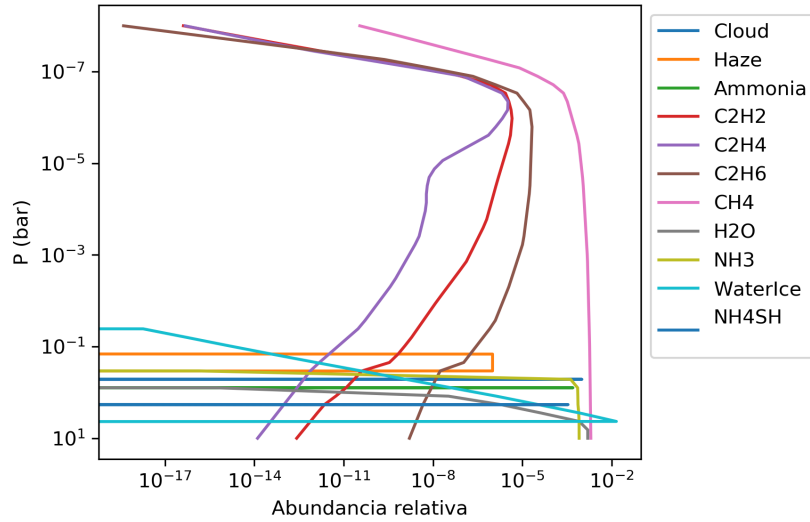


Figura 3.9: Perfil vertical de los compuestos de la atmósfera joviana en el modelo utilizado. Los nombres de los compuestos se han mantenido con su denominación en el PSG. Nótese que la notación química hace referencia a las especies en fase gaseosa, mientras que las especies de aerosoles se nombran como se indica en el texto principal.

Inicialmente, se asume que la niebla ('Haze') reside en los niveles verticales mostrados en la Figura 3.9, pero que en el resto de la atmósfera estas partículas no están presentes. Nuestro código alberga la opción de generar este tipo de perfil rectangular que resulta útil para aerosoles, mientras que para condensables, por encima de la región de condensación sería más acertado emplear una densidad decreciente con la escala de altura. Por otra parte, la Figura 3.10 muestra las transmitancias de los compuestos frente a la longitud de onda en el modelo de referencia.

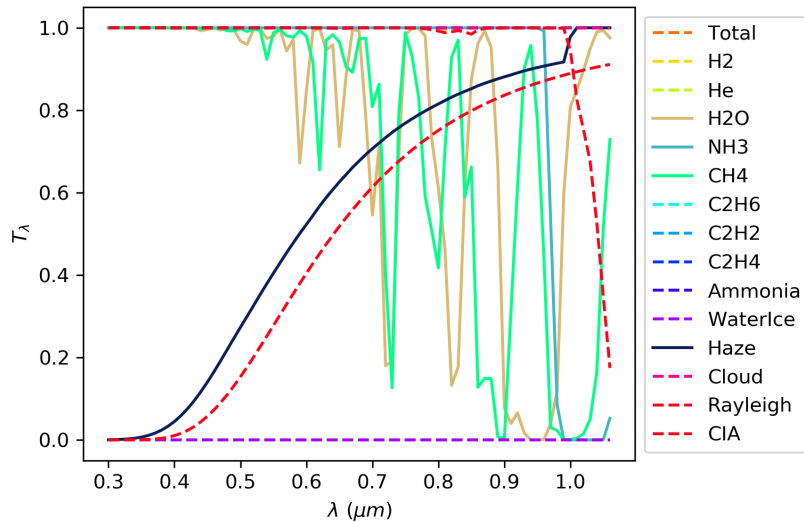


Figura 3.10: Transmitancias de los compuestos de la atmósfera de Júpiter frente a la longitud de onda.

El aerosol 'Ramirez_Titan_aerosol_HRI' de PSG (Ramirez et al., 2002) elegido en Munguira (2019) para Júpiter, representado en la Figura 3.10 bajo la denominación 'Haze', presenta una dependencia de la transmitancia con la longitud de onda similar a la de la dispersión Rayleigh del gas mayoritario en Júpiter, el H_2 , pero debida en este caso principalmente a la absorción. La niebla contribuirá a extinguir la luz en el rango del azul (Figura 3.8), provocando la tonalidad rojiza de Júpiter. Además, destacan las transmitancias del CH_4 y la del NH_3 entorno a una micra, que son las que producen las bandas de absorción ya mencionadas de la Figura 3.8. El H_2O por su parte también presenta bandas de absorción en este rango, pero son menos pronunciadas en el espectro observado porque este compuesto es poco abundante en Júpiter y además condensa entorno al nivel

de presión de 3 bar (Banfield et al., 1998). Otras especies como los hidrocarburos (C_2H_X) tampoco son relevantes por no presentar bandas de absorción en el rango de interés. En ese sentido serían completamente prescindibles para este problema, aunque los mantenemos para tener un modelo atmosférico generalizable a otros rangos espectrales.

En la presente sección, conocido el valor ideal de los parámetros se explora la capacidad de convergencia de los dos métodos de *retrieval* propuestos, así como la idoneidad de cada uno en función del número de parámetros de ajuste, o dimensiones del problema.

3.3.1. Retrieval 1D

La teoría del problema inverso se ha detallado en la Sección 2.4. Antes de proceder a inferir las condiciones de partida del modelo que permitan explicar determinadas observaciones, conviene realizar un estudio previo. Como se ha expuesto, el primer paso en la resolución del problema inverso es discutir los parámetros que influyen en la física del fenómeno a estudiar. En primera instancia, es oportuno analizar el comportamiento del sistema físico frente a cada parámetro individualmente. He aquí un ejemplo de dicho procedimiento, que se aprovechará al ir escalando en el número de dimensiones elegidas para describir la niebla de Júpiter. Este proceso es extensible a otras atmósferas, aunque en cada caso habrá que atenerse a las particularidades del problema, como vamos a ver en el Capítulo 4.

Densidad de la niebla

El primer parámetro relevante para describir la niebla es su densidad, idealmente escalada a 1 en nuestro modelo de referencia ($scl = 1$). El espesor óptico de la capa aumentará para una mayor densidad, provocando una extinción de luz más eficiente a la altura donde se sitúa la niebla (Ver Figura 3.9). Como se ha adelantado, se ha escrito en Python una función capaz de editar un fichero de configuración (que es el primer parámetro¹⁰ de entrada) de tal forma que se multiplique la abundancia de un compuesto, $N_i(z)$, por un factor de escala (segundo parámetro de entrada), dando lugar a una nueva modelización de la atmósfera. Sólo entonces, la función realiza una llamada al código de RT del PSG, vía API, siendo su salida χ^2 (Ecuación 22) la medida de la correlación entre el espectro generado y el observado (tercer parámetro de entrada requerido por la función). Además, durante el TFM el flujo de radiación del nuevo modelo y su archivo de configuración se han devuelto como variables globales para poder dibujar la comparativa de los espectros desde fuera de la función, cuando interese, sin que esto interfiera y ralentice el método de *retrieval*. Nótese que éste es un caso unidimensional, ya que el modelo creado se ajusta por medio de un único parámetro: el factor de escala para $N_{Haze}(z)$. Al añadir más dimensiones, aumentan los parámetros de entrada de la función y se modifica convenientemente la edición del fichero de configuración, pero la estructura de la función aquí expuesta se mantendrá invariable (Apéndice A).

Para analizar la influencia del parámetro (factor de escala para $N_{Haze} = 10^{-6}$) sobre el espectro, se itera la función de llamada al PSG recorriendo el espacio de parámetros unidimensional y se dibuja la anticorrelación entre modelo y observaciones, χ^2 , frente a los valores que toma el factor de interés.

¹⁰No confundir los parámetros de entrada de una función de Python con los parámetros de ajuste

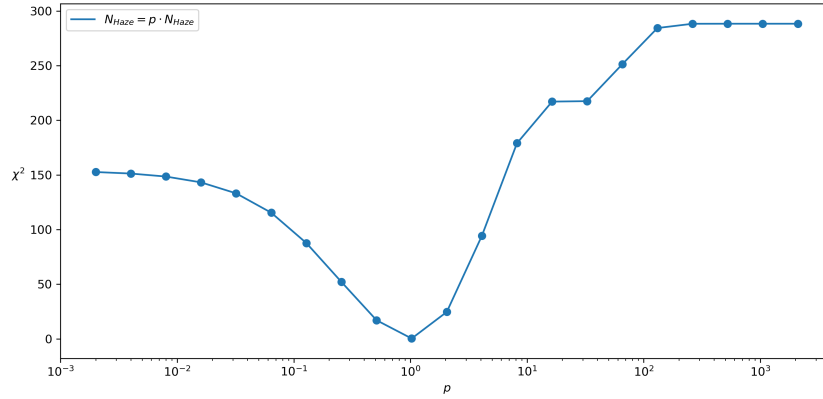


Figura 3.11: Anticorrelación del modelo con las observaciones sintéticas en función del parámetro de escala para la densidad de la niebla.

Como muestra la Figura 3.11, existe un mínimo entorno a $p = 1$, que se corresponde con el factor de escala nominal. Como se ha visto en la Sección 2.4, cuanto menor sea el valor de χ^2 mejor será el ajuste de las observaciones por medio del modelo. Por lo tanto, el interés radica en minimizar el factor χ^2 sin necesidad de explorar por completo el espacio de parámetros usando el método que se suele llamar ‘fuerza bruta’. Los métodos de *retrieval* son los encargados de buscar el mínimo de la función, por esta razón la función implementada debe tomar χ^2 como única salida. A continuación, se procede a comparar el rendimiento de los dos métodos de *retrieval* adaptados e incluidos en nuestro código: el método Nelder-Mead de la función `scipy.optimize.minimize()` de Python y el *optimal estimation method* de PSG.

- *simplex* de Nelder-Mead:

La técnica de convergencia del método *simplex* se ha expuesto en la Sección 2.4. Idealmente, nuestra implementación debería proceder de forma similar para asumir que funciona correctamente. A fin de cotejar esto, se han dibujado en la Figura 3.12 los pasos de Nelder-Mead sobre una región significativa de la función $\chi^2(p)$. Se ha indicado el orden de los pasos más relevantes (los que se emplean hasta ‘caer’ al valle), mientras que los puntos cuya numeración ha sido omitida por claridad son los utilizados para ajustar el valor de p entorno al mínimo, hasta la precisión requerida. Cabe destacar que el parámetro p debe satisfacer $p \geq 0$. A fin de imponer esta restricción sobre la exploración del espacio que realiza Nelder-Mead, una de las posibilidades es reasignar un valor grande al parámetro siempre que para evaluar la función se pasen valores negativos del mismo (Nelder and Mead, 1965). Esto provocará una rápida contracción en el método *simplex*. Para restringir los valores negativos y producir el efecto deseado de contracción, el único requisito es que el valor asignado a p sea lo suficientemente lejano al que minimiza la función $\chi^2(p)$, y por tanto se ha elegido el número por excelencia de la ciencia-ficción: 42.

El método Nelder-Mead en `scipy.optimize.minimize()` admite como inicialización un valor ‘a priori’ del parámetro de interés, permitiendo realizar hipótesis, o una matriz de dimensión $(N+1, N)$, donde N es el número de parámetros de nuestro problema, que contiene los vértices de la región del espacio inicial (*simplex*). En este caso, la convergencia a partir de una hipótesis $p_0 = 1$ sería demasiado fácil, y no aseguraría la robustez del método de cara a obtener buenos resultados más adelante. En su lugar, la Figura 3.12 muestra el proceso a partir de un *array* inicial de dos puntos $p_1 = 0$ y $p_2 = 10$. La convergencia¹¹ ha ocurrido en $p_f \approx 1.006$ tras 16 evaluaciones para la función y un tiempo $t = 81s$, siendo $\chi^2_{min} \approx 0.30$. Obviamente, el valor de p esperado era cercano a la unidad, pero no exactamente igual, ya que las observaciones sintéticas han sido generadas con la introducción de un ruido aleatorio.

En la Figura 3.12 se puede ver que la secuencia de pasos sigue lo comentado en la Sección 2.4. Inicialmente, se evalúa la función en los vértices iniciales (el paso 0 está en $p = 0$ y el 1

¹¹ Al trabajar con Nelder-Mead, las cifras significativas indicadas para p_f y χ^2 a lo largo del proyecto atienden a la precisión requerida a la función `scipy.optimize.minimize()` para la convergencia

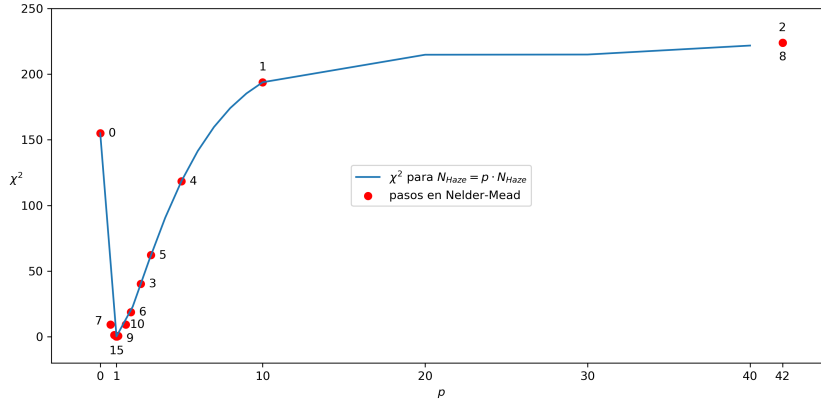


Figura 3.12: Método simplex de Nelder-Mead sobre $\chi^2(p)$, los pasos hacia la convergencia han sido enumerados y dibujados como puntos rojos.

en $p = 10$). Después, como la correlación es peor en $p = 10$, se hace su reflexión entorno al punto medio del resto de vértices (en una dimensión, el propio $p = 0$), así que en el paso número 2 se introducirá un valor negativo de p . No obstante, como estos valores se han evitado reasignándolos a $p = 42$ el paso 2 se encuentra ahí, y como la correlación es aún peor que en $p = 10$, el vértice se contrae (aún dentro de la primera iteración del algoritmo). El paso 3 da lugar a un mejor resultado que permite saltar a la siguiente iteración con este nuevo vértice tomando el lugar de $p = 10$. Ahora, el vértice que da lugar al valor máximo de χ^2 no es otro que $p = 0$, así que dicho vértice se proyecta respecto al vértice asociado al paso 3. En pasos sucesivos, se ve cómo poco a poco el método de Nelder-Mead cae hacia el mínimo de la función.

Ahora, se corre el código de Nelder-Mead con $p_0 = 5$ y $p_0 = 1$, lo cual ha sido descartado para corroborar su buen hacer pero resulta útil para comparar su rendimiento con el *optimal estimation method*. Estos resultados se recogen en la Tabla 3.1. Cabe destacar que la precisión requerida a Nelder-Mead para la convergencia no es excesiva, ya que se ha aligerado siempre en base a nuestros propósitos. A pesar de ello la correlación es suficientemente buena. De hecho, la correlación en la Tabla 3.1 es mejor que con el PSG (Tabla 3.2), pero la ligera variación no es significativa.

p_0	p_f	χ^2	n_{fev}	t
5	0.989	0.32	18	98 s
1	0.991	0.32	6	31 s

Tabla 3.1: Convergencia del retrieval con Nelder-Mead para p con precisión moderada.

- *Optimal estimation method* con el PSG:

Como se ha dicho en la Sección 3.2, en PSG se puede comprobar que el proceso de *retrieval* finaliza con éxito, es decir, que el mensaje devuelto es el siguiente: ‘STATUS: 1 SUCCESS (Convergence in chi-square)’. Sin embargo, por la propia naturaleza de la herramienta del PSG, no se muestran las evaluaciones intermedias del *retrieval* ni sus correlaciones asociadas. Este diseño impide explorar el espacio de parámetros como se hacía anteriormente (Figura 3.11). En este caso, a la hora de certificar la calidad de los resultados entrará en juego otro tipo de ingenio.

Con el fin de comparar este segundo método con el de Nelder-Mead se va a inicializar el *retrieval* del parámetro de escala de la niebla, cuyo nombre en el fichero de configuración es ‘AEROSOL-Haze’, con ‘scl’ como unidades, $p_{min} = 0$, $p_{max} = 10$ y distintos valores para p_0 (el valor ‘a priori’) y γ , como se muestra en la Tabla 3.2. En ella también se incluyen los elementos clave del *output*: el valor del parámetro de ajuste p_f junto con su incertidumbre, devuelta por el PSG; la desviación cuadrática media χ^2 de las observaciones frente al mejor

modelo; el número de evaluaciones de la función, n_{fev} , y el tiempo invertido en la resolución del problema, en segundos.

p_0	γ	p_f	χ^2	n_{fev}	t
1	1.0	1.01 ± 0.01	0.45	3	36 s
5	1.0	1.01 ± 0.01	0.45	13	157 s
1	10.0	1.01 ± 0.01	0.45	3	36 s
5	10.0	1.01 ± 0.01	0.45	13	157 s

Tabla 3.2: Convergencia del retrieval de PSG para p en función de p_0 y γ .

Analizando los resultados de la Tabla 3.2, parece claro que en el caso unidimensional γ no es relevante en el comportamiento de la herramienta de *retrieval*, ya que la convergencia ha ocurrido para el mismo valor p_f del parámetro de ajuste, independientemente del valor inicial p_0 . No obstante, el ‘a priori’ afecta directamente al número de evaluaciones requeridas de la función, y por consiguiente al tiempo invertido en el proceso. Tomando $p_0 = 5$ la herramienta del PSG invierte 157 segundos para llegar al estado final. Este mismo caso se ha resuelto con el método de Nelder-Mead (Tabla 3.1), alcanzándose la convergencia tras 18 evaluaciones y 98 segundos (un minuto menos). El método de Nelder-Mead también ha sido ligeramente más veloz con $p_0 = 1$, donde se obtiene la convergencia con 6 evaluaciones de la función al cabo de 31 segundos.

Como primera conclusión, el método *simplex* es óptimo en una dimensión, ya que no calcula derivadas. Sin embargo, este no es capaz de computar incertidumbres, lo cual es una desventaja. En cambio, la herramienta de *retrieval* del PSG computa incertidumbres y jacobianos, así que abarca un mayor número de escenarios y está pensada para alcanzar su máximo de eficiencia al hacer frente a problemas de múltiples parámetros. Es evidente que existen diferencias entre ambos métodos de *retrieval*, lo cual provee un abanico interesante de posibilidades a explotar. En lo sucesivo, se seguirá explorando el comportamiento de ambos métodos en paralelo hasta dilucidar la utilidad de cada uno de ellos.

Tamaño de partículas

Otro parámetro que se antoja crucial en el efecto radiativo de nubes y nieblas es el tamaño de las partículas, a . En primera aproximación, asumiendo que las partículas son esféricas, a será equivalente a su radio. Esta aproximación debe tratarse con precaución en el caso de cristales de hielo, que adquieren formas muy irregulares, entre otras cosas por la adición entre ellos (Hansen and Travis, 1974). En cualquier caso, en base a lo explicado en el Capítulo 2, el tamaño de las partículas influirá en el espesor óptico de una capa nubosa por medio de la sección eficaz de extinción, que puede ser interpretada como una probabilidad de que la partícula interfiera con la radiación (Sanchez-Lavega, 2011). Con nuestro programa, es posible estudiar la dependencia de la transmitancia de la niebla con el tamaño de partículas, y en consecuencia su efecto sobre el espectro reflejado.

Como en el caso anterior, se va a explorar el espacio unidimensional del parámetro a_{Haze} , obteniendo la correlación de los distintos modelos con las observaciones (Figura 3.13). En este caso, el valor preliminar es $a_{Haze} = 0.03 \mu m$. Esto presenta una gran ocasión para testar los métodos de *retrieval* cerca del 0, ya que su eficiencia se puede ver comprometida por la necesidad de evaluar la función en pasos excesivamente cortos y en una zona de transición entre valores positivos y negativos.

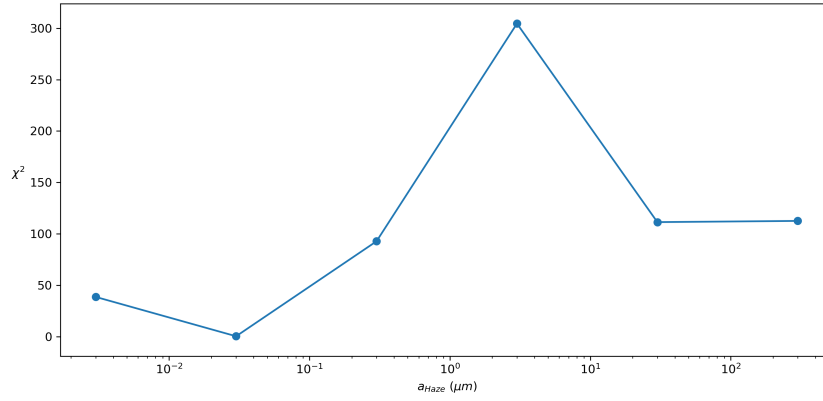


Figura 3.13: Anticorrelación del modelo con las observaciones sintéticas en función del tamaño de partículas de la niebla.

■ *simplex* de Nelder-Mead:

La convergencia alcanzada con los métodos de *retrieval* se expone nuevamente mediante una sucesión de tablas. Cabe destacar que en el código propio, esta vez se han tratado de evitar los valores negativos del parámetro de ajuste con el método del logaritmo (Ecuación 29), tal y como se menciona en Nelder and Mead (1965), ya que la primera alternativa de reasignar los valores negativos de la variable a valores muy grandes no ha sido de utilidad. Sea q el valor asignado por Nelder-Mead al parámetro de ajuste al inicializar cada evaluación de la función, se ha incluido el siguiente paso al principio de la función a minimizar:

$$\text{si } q < 0 \longrightarrow p = 10^q \quad (29)$$

p_0 (μm)	p_f (μm)	χ^2	n_{fev}	t	ÉXITO
1	0.	38.81	12	62 s	✗
0.1	0.030	0.38	14	70 s	✓
0.01	0.029	0.39	12	60 s	✓
0.03	0.030	0.38	6	31 s	✓

Tabla 3.3: Convergencia del *retrieval* con Nelder-Mead para a_{Haze}

Se ha incluido una columna que indica si la convergencia es correcta o errónea¹². En el primer caso ($p_0 = 1$), basándonos en la Figura 3.13 resulta llamativo el desatino del método al converger. Dicha figura explora únicamente los órdenes de magnitud del tamaño de partículas, que nos situarán en un régimen de scattering u otro, pero no contiene suficientes evaluaciones en el rango $a_{Haze} \in [0.03, 1] \mu m$, así que en la Figura 3.14 se ha estudiado esta región en particular.

¹²Este indicador se centra en comparar el valor final con el nominal, independientemente de que el método correspondiente haya indicado una convergencia exitosa

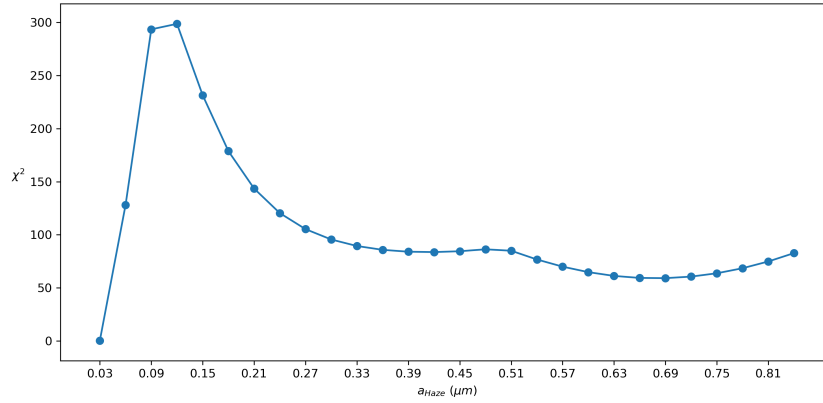


Figura 3.14: Anticorrelación del modelo con las observaciones sintéticas en función del tamaño de partículas de la niebla. Región: $a_{Haze} \in [0.03, 1] \mu m$.

La Figura 3.14 muestra una gran ‘cumbre’ entorno a $p = 0.1 \mu m$, lo que dificulta al algoritmo de Nelder-Mead encontrar el mínimo absoluto que se encuentra al otro lado, al hilo de lo expuesto en la Sección 2.4. A raíz de ello, se ha probado a inicializar el *retrieval* en la cumbre ($p_0 = 0.1 \mu m$) y al otro lado de la misma ($p_0 = 0.01 \mu m$). En resultados posteriores de la Tabla 3.3, queda claro lo ventajoso de la práctica de afrontar un problema multidimensional empezando por explorar individualmente cada parámetro, siempre que sea posible. Esto permitirá tener una idea previa de las regiones del hiperespacio que pueden ser conflictivas, para así evitarlas o explorarlas por separado. En general, el código presenta un buen rendimiento si se le pasa un vector inicial de parámetros de ajuste apto para evitar caer en un ‘valle secundario’ (Tabla 3.3).

Otra posibilidad reside en inicializar el método de Nelder-Mead con vértices del *simplex*. Esta inicialización es sumamente interesante, ya que constituye una forma de indicarle a dicho método el orden de magnitud de los saltos que debe dar, lo cual es de especial ayuda cerca del cero. Los resultados se recogen en la Tabla 3.4:

$p_{min} (\mu m)$	$p_{max} (\mu m)$	$p_f (\mu m)$	χ^2	n_{fev}	t	ÉXITO
0	1	0.	38.96	7	35 s	✗
0	0.1	0.	38.96	5	25 s	✗
0.01	1	0.01	38.96	7	35 s	✗
0.01	0.1	0.01	38.96	5	26 s	✗

Tabla 3.4: Convergencia del *retrieval* con Nelder-Mead para a_{Haze} inicializándolo con vértices del *simplex* y evitando los valores negativos con el método del logaritmo.

A consecuencia de haber tomado $p_{min} = 0$ como vértice, la irrupción del método de Nelder-Mead en la región de valores negativos del parámetro trae consigo una convergencia errónea a pesar de que la función `scipy.optimize.minimize()` no devuelve ningún mensaje en esta línea, sino todo lo contrario: ‘Optimization terminated successfully’. Lo mismo ocurre con $p_{min} = 0.01$. Se han probado a reasignar los valores negativos mediante otras bases logarítmicas en la Ecuación 29, así como a aumentar el requerimiento de precisión para la convergencia de Nelder-Mead, pero sin resultados satisfactorios. Para un caso donde la solución está entorno al 0 y además Nelder-Mead debe explorar el espacio de parámetros en saltos pequeños, ninguna de las dos técnicas discutidas para rehuir los valores negativos es realmente eficiente. Este problema no es del todo insalvable si se reasignan los valores negativos de entrada a su valor absoluto. Repitiendo los casos de la Tabla 3.4 con la modificación de que si $q < 0$, entonces¹³ $p = |q|$, se obtienen los resultados de la Tabla 3.5.

¹³La notación de la Ecuación 29 se mantiene

p_{min} (μm)	p_{max} (μm)	p_f (μm)	χ^2	n_{fev}	t	ÉXITO
0	1	0.	38.96	7	37 s	✗
0	0.1	0.029	0.29	10	50 s	✓
0.01	1	0.01	38.96	7	36 s	✗
0.01	0.1	0.030	0.29	12	60 s	✓

Tabla 3.5: Convergencia del retrieval con Nelder-Mead para a_{Haze} inicializándolo con vértices del simplex y evitando los valores negativos con el valor absoluto de $q < 0$.

Comparando las dos últimas tablas es inmediato ver que la técnica del valor absoluto sólo funciona si el orden de magnitud de los saltos de Nelder-Mead en el parámetro de ajuste es el adecuado. Aún así, esto supone un avance hacia una mayor probabilidad de encontrar el mínimo en el entorno del 0.

■ *Optimal estimation method* con el PSG:

En este caso, el nombre de la variable a_{Haze} en el fichero de configuración del PSG es ‘AEROSOL-SIZE-Haze’, con unidades ‘um’, que indican micras. Para explorar casos similares a los ya analizados con el método de Nelder-Mead se va a empezar sin grandes restricciones en el valor que puede tomar el parámetro de ajuste. Se ha considerado oportuno tomar $p_{min} = 0.01$ y $p_{max} = 2$ en PSG y ver qué sucede con distintos valores para p_0 y γ .

p_0 (μm)	γ	p_f (μm)	χ^2	n_{fev}	t	ÉXITO
1	0.0, 1.0	0.577	114	3	41 s	✗
0.01	0.0, 1.0, 10.0	$0.0294 \pm 2 \cdot 10^{-4}$	0.44	11	133 s	✓
0.1	1.0	0.209	150.06	15	181 s	✗
0.03	1.0, 10.0	$0.0294 \pm 2 \cdot 10^{-4}$	0.44	5	61 s	✓

Tabla 3.6: Convergencia del retrieval de PSG para a_{Haze} en función de p_0 y γ .

En este caso, el método de *retrieval* tampoco es capaz de alcanzar la solución si se parte de $p_0 = 1$, pero el PSG presenta la ventaja de que da un mensaje de error en lugar del ‘SUCCESS’ comentado anteriormente: ‘Divergence in chi-square (status -1)’. Este mensaje pondrá al usuario en conocimiento de que el proceso no ha ido según lo esperado y aumentará su cautela a la hora de resolver el problema. Como en el caso de la abundancia de la niebla, en la Tabla 3.6 se comprueba para $p_0 = 0.01$ que en una dimensión el parámetro γ no resulta determinante y que el método de Nelder-Mead es más rápido (Tabla 3.3). Por analogía con dicho estudio se ha probado $p_0 = 0.1$ en el *retrieval* del PSG, pero esta herramienta no es capaz de converger al valor correcto desde ahí ni siquiera estrechando el rango hasta $p_{max} = 1$. De aquí se deduce que el método de Nelder-Mead es más adaptable, al menos en una dimensión, en lo que respecta a los valores ‘a priori’. No obstante, con $p_0 = 0.1$ el mensaje que ha devuelto el PSG ha sido: ‘Convergence in chi-square (status 1)’, por lo que siempre va a ser necesario analizar y comprobar los resultados con detenimiento. En última instancia, una opción para lidiar por nuestra cuenta con errores en la convergencia sería imponer un valor máximo aceptable a χ^2 . Por último, se ha inicializado el *retrieval* con el valor nominal para completar el test de la herramienta, lo que ha reforzado las ideas señaladas a lo largo del párrafo.

En conclusión, cualquier algoritmo de minimización de una función se enfrenta a dos obstáculos: las soluciones cerca del cero, que pueden dar lugar a evaluaciones de la función con parámetros que adquieren valores negativos sin sentido físico, y la presencia de ‘valles’ secundarios separados por ‘cordilleras’. Un análisis previo del espacio de parámetros ayuda a solventar ambas situaciones. En muchos casos, una buena elección de los valores iniciales y de los límites del espacio de parámetros conducirá al éxito de la convergencia.

3.3.2. Retrieval 2D

El caso bidimensional se va a explorar aunando los dos parámetros de la niebla¹⁴ cuyo estudio previo se ha realizado en la Subsección 3.3.1. Previsiblemente, la principal novedad va a ser la irrupción de la degeneración en el sistema. Los valores nominales son $s = 1$ y $a_{Haze} = 0.03 \mu m$, pero en el caso bidimensional sería posible que otra combinación de valores diese lugar a un espectro similar al observado (Sección 2.4). En efecto, los dos parámetros de ajuste se han elegido intentando que estén fuertemente acoplados, ya que ambos contribuyen al problema de RT a través del espesor óptico de la niebla.

Sin más preámbulo, se explora la correlación del modelo con las observaciones en el espacio de parámetros bidimensional. En este caso, se prescinde de distinguir los valores $\chi^2 > 100$ porque no son de interés para la resolución del problema inverso, si bien es cierto que pueden ayudar a entender por qué los métodos de minimización convergen al valle secundario para algunas configuraciones iniciales.

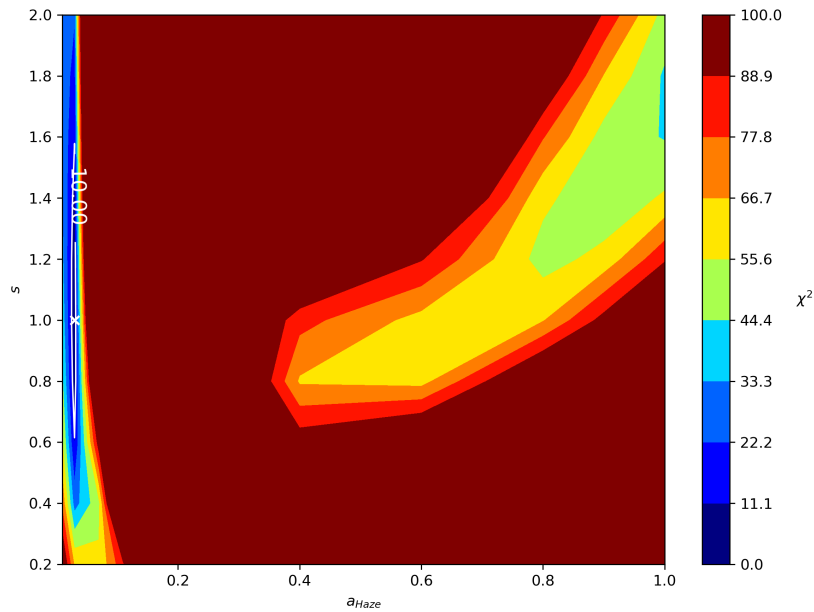


Figura 3.15: Anticorrelación de modelo y observaciones sintéticas en 2D como función de s y a_{Haze} . El resultado nominal se indica por una cruz blanca, y la línea de nivel $\chi^2 = 10$ se dibuja con el mismo color. Aparecen dos ‘valles’, aunque el secundario está muy alejado del valor aceptable: $\chi^2 \lesssim 1$. La barra de color se ha saturado por encima de $\chi^2 = 100$.

La Figura 3.15 muestra la solución óptima arrinconada por una gran ‘cumbre’ que separa dos ‘valles’. La línea de nivel donde se encuentra la solución óptima es prácticamente vertical, lo que implica que el tamaño de partículas es el parámetro de mayor peso en el ajuste. Por ello, la degeneración no es un quebradero de cabeza en este caso, ya que el ‘valle’ secundario da lugar a un ajuste mucho peor. No obstante, esto no es una regla general y tampoco se puede descartar totalmente el acoplamiento de los parámetros. En consecuencia, se han evitado algunos métodos de minimización que afrontan el problema multidimensional de m parámetros como m problemas unidimensionales, como por ejemplo el método ‘Powell’ de `scipy.optimize.minimize()`.

A pesar de todo, la degeneración es un ‘callejón sin salida’ que siempre supone un contratiempo e incluso en este caso los métodos de minimización pueden terminar convergiendo hacia el ‘valle’ secundario. No existe una técnica infalible para solventar tal obstáculo (MacKay, 2003): tanto los métodos de inferencia bayesiana con distribuciones de probabilidad multimodales, como los de minimización de χ^2 donde aparezca más de un ‘valle’ son indeseables. Este es uno de los argumentos en favor de un estudio previo de los parámetros individuales y sus acoplamientos. Sólo así es posible

¹⁴En adelante, el parámetro de escala para la densidad de la niebla se denotará por la letra s . De esta forma $N_{Haze} = s \cdot N_{Haze}$.

evitar las regiones críticas de forma razonable, con un vector inicial de parámetros adecuado para la tarea, al igual que se ha propuesto anteriormente. Otra opción que se baraja en lo sucesivo es acotar el espacio de parámetros lo máximo posible, sin necesidad de variar el número de puntos de malla, como en la Figura 3.16, lo que potencialmente podría ayudar a descartar ‘valles’ secundarios. En cualquier caso, conviene ser prudentes a la hora de realizar hipótesis. En última instancia, sólo una exploración completa del espacio ‘a posteriori’ puede despejar las dudas definitivamente, pero esto tiene un coste computacional que normalmente se desea evitar.

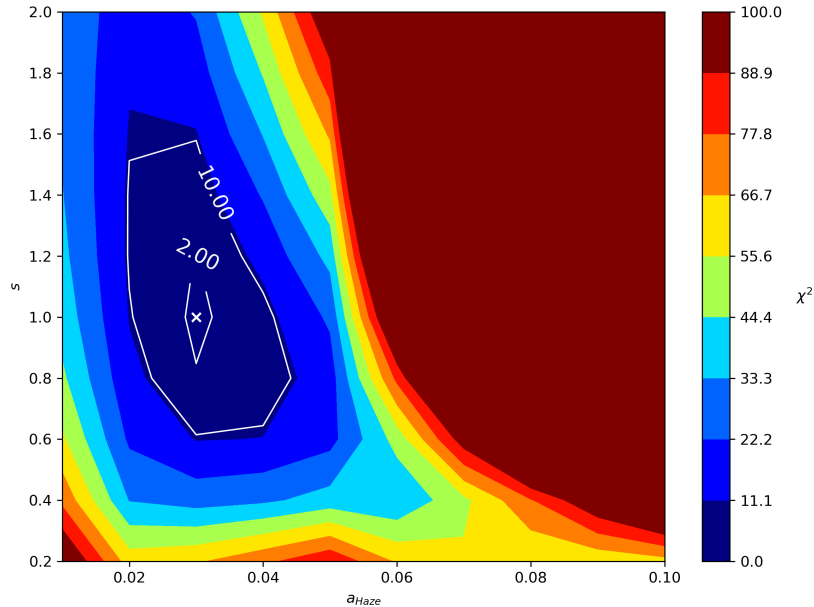


Figura 3.16: Mismo problema de la Figura 3.15 pero con el espacio de parámetros contraído alrededor de la solución. El ‘valle’ secundario desaparece en este rango espacial. Se ha incluido la línea de contorno $\chi^2 = 2$.

■ *simplex* de Nelder-Mead:

Como se ha demostrado, la inicialización más versátil para Nelder-Mead, en el caso que nos ocupa, será un vector inicial de valores para los parámetros de ajuste que aglutine nuestro conocimiento ‘a priori’. Siguiendo la dinámica de la Subsección 3.3.1 se presenta tabulada la capacidad de convergencia del código en función del vector inicial $\vec{x}_0 = (s_0, a_0)$ ¹⁵:

s_0	a_0 (μm)	s_f	a_f (μm)	χ^2	n_{fev}	t	ÉXITO
1	0.01	1.010	0.030	0.33	62	312 s	✓
1	0.1	1.010	0.030	0.33	67	340 s	✓
1	0.6	1.724	1.000	42.72	90	460 s	✗
2	0.1	1.724	1.000	42.72	159	808 s	✗
0.2	0.4	1.010	0.030	0.33	102	520 s	✓

Tabla 3.7: Convergencia del retrieval con Nelder-Mead para s y a .

En el presente caso el número de evaluaciones de la función aumenta sustancialmente, con el consiguiente incremento en la duración del proceso. Se ha inicializado Nelder-Mead desde varias regiones de la Figura 3.15. Por un lado, la convergencia más rápida ocurre si se parte desde el ‘valle’ donde se encuentra la solución, como es natural. Otra opción es empezar

¹⁵Se ha omitido el subíndice ‘Haze’ en el tamaño de partículas, a , con el fin de aligerar la notación, ya que sólo se están estudiando parámetros de la niebla

en la ‘cumbre’ que separa los dos ‘valles’, pero encontramos una situación contrapuesta: convergencia a la solución desde $\vec{x}_0 = (1, 0.1)$, pero al segundo ‘valle’ desde $\vec{x}_0 = (2, 0.1)$, quizá por no haber seleccionado la ‘cumbre’ exacta, sino una región con pendiente descendente hacia dicho ‘valle secundario’. Por último, se ha empezado lejos de la solución en una ‘cumbre’ esquinada y se ha logrado una convergencia adecuada a costa de casi duplicar las evaluaciones de la función. Esto ratifica la versatilidad del método de Nelder-Mead, extendiéndola a dos dimensiones.

■ *Optimal estimation method* con el PSG:

Como se ha visto anteriormente, el *retrieval* en PSG exige una restricción explícita de los parámetros de ajuste. Por consistencia con el espacio explorado en la Figura 3.15 se comienza asignando los siguientes límites: $s_{min} = 0.2$, $s_{max} = 2$, $a_{min} = 0.01 \mu m$, $a_{max} = 1 \mu m$. Además, la herramienta también calcula la incertidumbre de los valores devueltos, que se respeta al presentar los datos de las operaciones exitosas en la Tabla 3.8.

s_0	$a_0 (\mu m)$	s_f	$a_f (\mu m)$	γ	χ^2	n_{fev}	t	ÉXITO
1	0.01	2.0	0.01	1.0	37.67	8	190 s	✗
1	0.1	1.00 ± 0.01	$0.0297 \pm 2 \cdot 10^{-4}$	1.0	0.45	22	267 s	✓
1	0.05	1.00 ± 0.01	$0.0297 \pm 2 \cdot 10^{-4}$	1.0	0.45	16	195 s	✓
2	0.1	1.00 ± 0.01	$0.0297 \pm 2 \cdot 10^{-4}$	1.0	0.45	22	268 s	✓
1	0.6	1.38 ± 0.01	1.0 ± 0.5	1.0	16.61	43	521 s	✗
0.2	0.4	0.51 ± 0.01	0.37 ± 0.03	1.0	14.54	13	166 s	✗

Tabla 3.8: Convergencia del *retrieval* con PSG para s y a .

El mensaje devuelto en el primer caso, $\vec{x}_0 = (1, 0.01)$, es: ‘All variables are pegged to the limit (status -2)’. Sin embargo, como el siguiente vector inicial ha sido acertado, el error podría deberse a una inicialización demasiado próxima a 0. Por ello, se ha probado a alejar un poco a_0 de la región conflictiva en $\vec{x}_0 = (1, 0.05)$. En este método, la inicialización de $\vec{x}_0 = (2, 0.1)$ conduce al éxito, posiblemente por la magnitud del salto en los parámetros durante el ajuste. Con $\vec{x}_0 = (1, 0.6)$ se ha obtenido otro mensaje: ‘Maximum number of iterations reached (status 2)’, ya que hay un máximo número de iteraciones, regulado conforme a la cantidad de parámetros de ajuste. Por último, se ha repetido el proceso con $\vec{x}_0 = (0.2, 0.4)$, que aparentemente converge según la herramienta de PSG y por lo tanto se da la incertidumbre, pero que no satisface los valores nominales ni la correlación perseguida.

Al haber ascendido a dos parámetros, el método de *retrieval* del PSG sobrepasa en velocidad al de Nelder-Mead en todos los escenarios. Además, este último no sólo infiere los valores de los parámetros sino también sus incertidumbres, lo que otorga información adicional acerca de la sensibilidad del espectro a cada parámetro.

3.3.3. Retrieval N-D

Una vez hecha la comparativa entre los dos métodos implementados en el código a fin de resolver el problema inverso, se procede a resaltar las virtudes de cada uno de ellos en problemas de más dimensiones. Para ello, se va a considerar otro aspecto fundamental en la descripción de las nubes y nieblas en las atmósferas planetarias: su altura. Esta variable también determina el efecto radiativo de dichas estructuras atmosféricas, e incluyéndola en el problema es factible desarrollar buenas aproximaciones para numerosas nubes y nieblas.

Sin ir más lejos, la distribución vertical de PSG, que en la Figura 3.9 está extendida a 50 niveles, otorga la opción de introducir la niebla en la región vertical deseada de la atmósfera. Otra posibilidad es reducir el número de parámetros necesarios para describir la altura de la niebla; en principio, asumiendo una configuración rectangular para la niebla o nube, bastaría considerar el

nivel de presión en la base de la niebla, P_{base} , y el nivel en la parte superior, P_{top} , con la ligadura $P_{base} > P_{top}$. El fichero de configuración del PSG no resulta amigable para variar la altura de la niebla de esta forma, y por tanto, al no existir estos parámetros en la herramienta de *retrieval*, ésta tampoco serviría a ese propósito. No obstante, aunque en PSG no existan tales parámetros, se ha ideado una forma de ajustar la altura con esta segunda parametrización en el modelo del PSG. Esto permitiría realizar un *retrieval* de 4 parámetros con el método de Nelder-Mead. Tal y como se ha visto, un aumento en las dimensiones compromete al método de Nelder-Mead en lo que respecta a tiempo de ejecución, así que es conveniente reducirlas lo máximo posible. De hecho, aún es posible reducir más los parámetros fundamentales de la niebla si se escribe P_{top} como función de P_{base} como sigue:

$$P_{top} = C \cdot P_{base} \quad ; \quad 0 \leq C \leq 1 \quad (30)$$

El Apéndice A muestra una función optimizada para Nelder-Mead cuya entrada consiste en un vector de parámetros $\vec{x}_0 = (s_{Haze}, a_{Haze}, P_{base})$ y el conjunto de puntos del espectro observado, y a la salida se devuelve la anticorrelación de este con el modelo. Cabe destacar que antes de cambiar la altura de la niebla se lee la densidad máxima de ésta en el propio fichero de configuración inicial, para después insertar dicho valor en los niveles verticales correspondientes.

Esta es una situación donde se manifiesta la dificultad de estudiar cada parámetro involucrado de forma independiente, concretamente no es posible variar P_{base} de forma trivial en PSG sin variar el espesor inicial de la niebla, que en cada caso dependerá de la constante C que se haya utilizado y del propio valor de P_{base} . Aislar el parámetro P_{base} para explorar su espacio de parámetros es una tarea que requeriría un modelo más complejo. En este caso, el *retrieval* de Nelder-Mead estaría más sujeto que nunca a un conocimiento ‘a priori’ de la altura de la estructura atmosférica en cuestión, pero si se contase con alguna fuente de información al respecto, como pueden ser trabajos independientes previos, esta parametrización de la niebla y su análisis con Nelder-Mead es potencialmente relevante.

Por otro lado, con la descripción de la atmósfera en 50 niveles se alivia el requisito de conocimiento previo. Atendiendo a uno de los objetivos principales de este proyecto, referente a inferir perfiles verticales de temperatura, se va a testar el desempeño de la herramienta de *retrieval* con este volumen de parámetros. El fichero de configuración al que se está recurriendo constantemente no servirá en este caso: dadas las unidades de abundancia disponibles en la herramienta de *retrieval* de PSG, se ha tenido que escoger a tal efecto el factor de escala en cada nivel, lo que supone un problema para ajustar la abundancia de la niebla en aquellos niveles donde su densidad es nula. En su lugar, se ha inicializado el *retrieval* con el modelo de Júpiter habitual, con la salvedad de que se ha descrito la densidad de la niebla como constante en todos los niveles (Figura 3.17, en verde). El resultado del *retrieval* con estas condiciones iniciales (*C.I.*), o distribución vertical ‘a priori’ de la niebla, se presenta en la Figura 3.17.

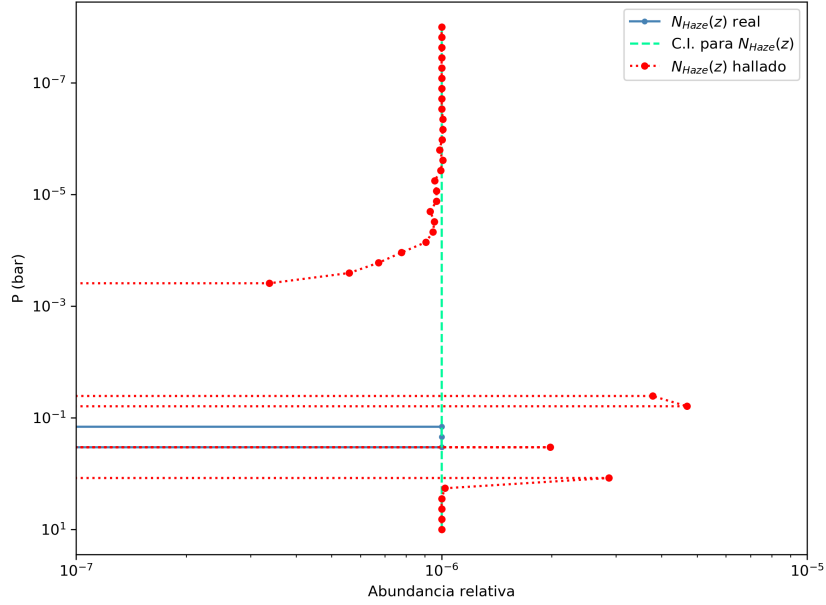


Figura 3.17: Retrieval de la abundancia de la niebla de Júpiter nivel a nivel. El perfil ‘real’ se presenta en azul, la inicialización en verde y los valores finales en rojo. Ambos ejes se representan en escala logarítmica.

El perfil $N(z)$ inferido toma un valor nulo donde el PSG no espera que la niebla esté presente. No obstante, si se centra la atención en la parte más alta de la atmósfera, es fácil deducir que algo no encaja, ya que la densidad de la niebla apenas se ha movido de su valor inicial y el valor nominal es 0 en esas capas. En este caso, entra en juego la incertidumbre en los parámetros de escala, Δs_i . Con ella, se puede determinar la sensibilidad del modelo atmosférico a cada parámetro con el inverso de su error relativo:

$$\frac{1}{\varepsilon_s} = \frac{s_i}{\Delta s_i} \quad (31)$$

Dibujando la presión frente a esta magnitud (Figura 3.18), se obtiene un valor nulo en el eje de abscisas en los niveles cuya incertidumbre es muy grande, y un pico allí donde la presencia de la niebla es más significativa y la inferencia cobra mayor sentido físico. Precisamente, en el entorno de 1 bar de presión. Es decir, es en este nivel donde el *retrieval* es más fiable, y a otros niveles (por encima o por debajo) simplemente devolvería un valor similar al valor ‘a priori’.

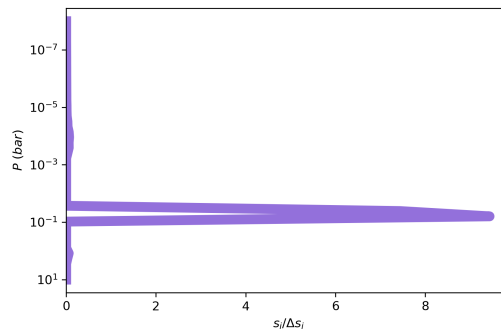


Figura 3.18: Sensibilidad del retrieval de la niebla en los diferentes niveles de la atmósfera de Júpiter.

En lo que respecta al tiempo de ejecución del *retrieval*, éste ha sido aproximadamente de 1 hora y se ha alcanzado el máximo número de iteraciones (20) con 771 evaluaciones¹⁶. Tanto en PSG como en Nelder-Mead el tiempo de ejecución del problema inverso está directamente ligado

¹⁶La llamada al *retrieval* no consume el máximo permitido de 1000 iteraciones por usuario

al número de evaluaciones de la función. Los cálculos del código de RT son la principal causa del coste computacional. Dentro de estos, la resolución espectral (o número de puntos) y los aerosoles constituyen los factores más críticos en el aumento de dicho coste. Por este motivo, se está abarcando el rango estudiado del espectro de Júpiter únicamente con 77 puntos, ya que hay 4 aerosoles ('WaterIce', 'Ammonia', 'Cloud' y 'Haze'). Realizar con Nelder-Mead esta tarea de *retrieval* para 50 parámetros es absurdo por la propia naturaleza del método, ya que una hipersuperficie de 51 vértices, de 50 dimensiones cada uno, debería converger a un punto, también de 50 dimensiones. Las evaluaciones de la función requeridas para completar dicho proceso excederían con mucho las 1000 llamadas que PSG permite cada día al servidor de NASA.

En resumen, el método de Nelder-Mead es muy interesante para la inferencia de parámetros en un problema de escasas dimensiones. Además, permite romper algunas barreras del *retrieval* del PSG. No obstante, en casos donde convenga obtener los parámetros junto con sus incertidumbres, o simplemente se tenga un volumen muy grande de éstos, merece la pena volcar todos los esfuerzos para resolver el problema inverso sobre la herramienta de *retrieval* del PSG.

4 Resultados

En esta sección se van a testar los cimientos del código sobre diferentes escenarios de las atmósferas planetarias. El objetivo es demostrar las capacidades de PSG para simular condiciones muy diferentes y para realizar *retrievals* a partir de ellas. Para servir a este propósito, se han elegido tres problemas físicos: el espectro reflejado de Urano y su disminución de CH_4 en latitudes altas, la inferencia del perfil vertical de temperatura a partir del espectro térmico de Marte en la banda de $15 \mu m$ del CO_2 y el estudio del efecto de las nubes y la temperatura en el espectro en transmisión de un exoplaneta. De esta forma se abarcan los tres tipos de medidas espectroscópicas en las atmósferas planetarias. Aunque el análisis en profundidad de cada uno de estos problemas podría en sí mismo suponer un Trabajo de Fin de Máster o incluso un doctorado, el objetivo de este proyecto es sintetizar la base teórica y dar unas pinceladas para exponer la versatilidad del PSG y el código.

4.1. Disminución de CH_4 en Urano

Urano es un planeta gigante compuesto en parte por materiales helados, y por tanto más denso que los gigantes gaseosos del Sistema Solar. Su tamaño es menor que el de éstos y posee un color verde-azulado, ya que como veremos, el CH_4 y las nubes presentes en la región atmosférica observable absorben fuertemente en el rojo (Irwin, 2009). Lo anterior es extrapolable a Neptuno. La principal capa de nubes está posiblemente compuesta de H_2S , mientras que una fina capa de cristales de CH_4 ('Methane') se observa en algunas regiones del planeta. Más abajo, se espera la condensación del NH_3 ('Ammonia'), NH_4SH y del H_2O ('WaterIce'). Todo ello está recogido por defecto en el PSG (Figura 4.1).

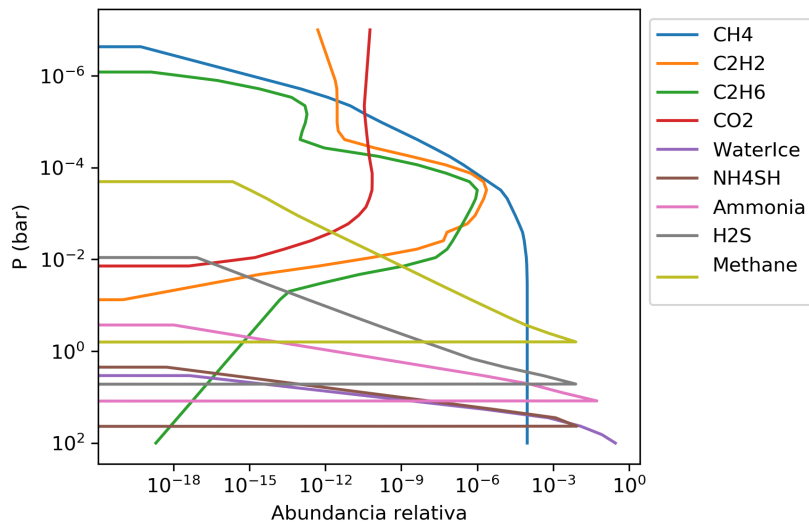


Figura 4.1: Perfil vertical de los compuestos de la atmósfera de Urano.

Urano presenta una peculiaridad, y es que su eje está inclinado 98° con respecto al plano de la eclíptica. Como consecuencia, sus polos están directamente expuestos a la radiación solar en ciertos puntos de su órbita y existe un efecto estacional importante. El instrumento IRIS de la nave Voyager 2 midió el gradiente de temperatura existente entre ambos polos cuando el Polo Sur estaba iluminado de pleno y el Polo Norte, por el contrario, inmerso en la oscuridad: apenas se observó diferencia en la temperatura, lo que indica que la circulación meridional del planeta redistribuye eficientemente la energía solar absorbida (Irwin, 2009). Se piensa que esta misma circulación meridional es responsable de una disminución de CH_4 observada en la troposfera superior de las regiones polares. En efecto, el decrecimiento en la tasa de metano y su magnitud en dichas regiones es un denominador común a las observaciones del Polo Norte en 2012 con el instrumento STIS (Space Telescope Imaging Spectrograph) y las del Polo Sur en 2002 (Sromovsky et al., 2014). El mecanismo atmosférico de circulación meridional vinculado a este fenómeno es aún objeto de estudio. Es chocante que la tasa de disminución del CH_4 sea parecida en ambas regiones

polares, teniendo en cuenta que el Polo Norte alberga estructuras nubosas asociadas a un origen convectivo, sin que en el Polo Sur se haya observado signo alguno de ellas.

La comprensión de la circulación meridional pasa por obtener medidas precisas de la abundancia del CH_4 en función de la latitud. Otros parámetros a tener en cuenta por su influencia sobre el espectro reflejado (visible e IR cercano) serán la absorción del H_2 (incluyendo las absorciones inducidas por colisión, *CIA*) y el efecto de los aerosoles (Figura 4.2). La absorción del H_2 domina algunas regiones y se ha comprobado que también es variable en escalas de tiempo de años, mientras que la presencia de aerosoles hasta la fecha ignorados, cuyo efecto radiativo sería pobremente conocido, podría inducir cierta degeneración a la hora de determinar la abundancia de CH_4 (Sromovsky et al., 2014).

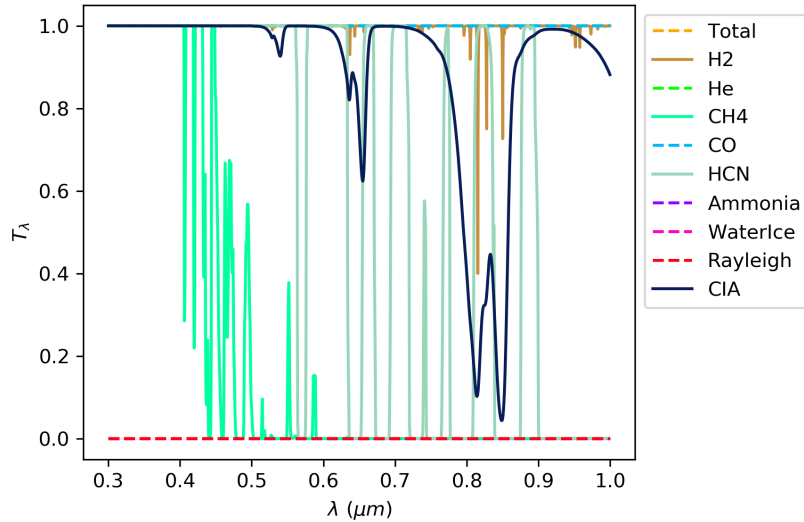


Figura 4.2: *Transmitancia de los compuestos atmosféricos en el espectro visible e IR cercano de Urano. Las líneas continuas se han asignado a los de mayor influencia.*

Valiéndonos del espectro de Urano en Karkoschka (1998), se ha generado en PSG un modelo capaz de reproducir sus principales características (En la Figura 4.3 se ha normalizado el flujo al espectro de Karkoschka para poder compararlos). Para ello, ha sido necesario aumentar en un factor 800 la abundancia del CH_4 y cambiar la base de datos del HCN que aparece por defecto en el PSG (HITRAN), por la base de datos EXO (la Figura 4.2 se ha obtenido a partir de estos criterios). También ha resultado beneficioso eliminar la nube de CH_4 . El factor de escala que ha sido necesario introducir para la abundancia del CH_4 a fin de reproducir la profundidad de las bandas de Karkoschka (1998) es totalmente subrealista. Tras comprobar a conciencia que no se ha cometido un error, se sigue obteniendo el factor de escala $s = 800$, que da como resultado un ratio de mezcla en volumen (*v.m.r.* al igual que en el Capítulo 3) del 7.6% para el CH_4 en Urano. El *v.m.r.* típicamente aceptado para el CH_4 en Urano es generalmente 4% (Sromovsky et al., 2014), mientras que en el mismo artículo se indica que en las regiones polares ha sido inferido un valor de entorno al 2%. Dada la disposición del encargado del PSG (Dr. Villanueva) para atender dudas o sugerencias, se le ha enviado un correo electrónico presentándole la situación. Al margen de esto, el modelo de la Figura 4.3 reproduce de forma aceptable las bandas espectrales en lo que se refiere a su intensidad y anchura. La discrepancia en longitudes de onda menores que 0.6 micras, donde el continuo del espectro de Karkoschka aparece elevado frente al de nuestro modelo, podría deberse a la ausencia de algún aerosol reflectante en el perfil vertical del PSG. Sin embargo, dicho aerosol no encaja con la capa de condensación del metano que ha sido omitida. Por otra parte, en la región de mayor absorción del metano se tiene una profundidad de las bandas algo sobreestimada. Esto puede deberse al factor con el que se ha normalizado el flujo del PSG para hacer que el continuo coincidiese con el de Karkoschka, ya que mediante un análisis con Nelder-Mead se ha descartado que el error provenga de la abundancia estimada para el CH_4 .

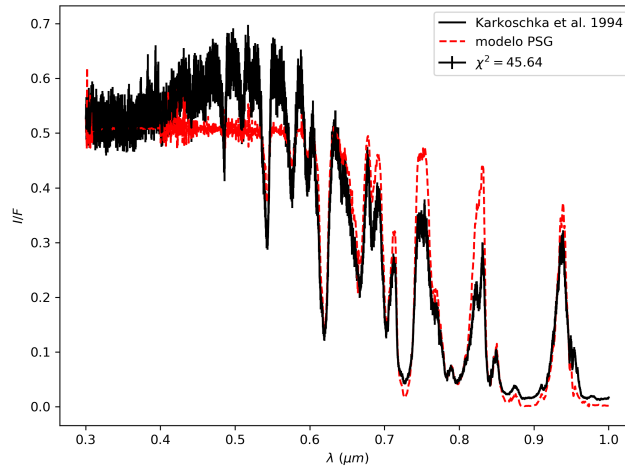


Figura 4.3: Espectro de Urano generado con el PSG (en rojo) frente al de Karkoschka (1998), dibujado en negro.

En PSG es posible observar la radiación reflejada proveniente de una determinada latitud, aunque en el caso de Urano la subsiguiente variación del CH_4 no está implementada. En primera instancia nos vamos a limitar a estudiar qué ocurre en el espectro de latitudes bajas si se varía la abundancia del CH_4 a la mitad (Figura 4.4). Para ello, se toma el modelo de la Figura 4.3 ($scl = 800$ para el CH_4) como punto de partida u observaciones sintéticas. Después, se estudia la capacidad de convergencia al valor original que tendrán los nuevos modelos habiendo introducido un ruido aleatorio, como se viene haciendo a lo largo del proyecto. En este caso no se ha normalizado la intensidad, sino que se muestra la obtenida en PSG.

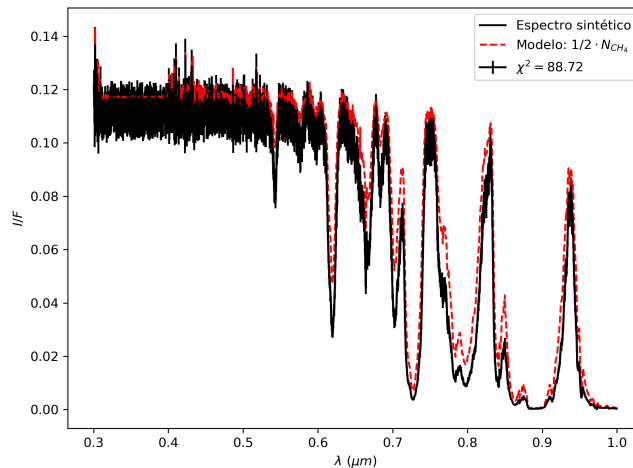


Figura 4.4: Espectro sintético de Urano generado con el PSG y con un ruido aleatorio (negro) frente al espectro generado en PSG para un modelo con la mitad de CH_4 (en rojo).

Los *retrievals* realizados con Nelder-Mead inicializando el modelo con distintos factores de escala para la densidad del metano, s , están indicados en la Tabla 4.1, siendo el valor nominal 800.

s_0	s_f	χ^2	n_{fev}	t
1	802.279	0.33	41	398 s
400	802.383	0.33	27	263 s
800	802.344	0.33	15	145 s
1200	802.383	0.33	25	245 s

Tabla 4.1: Convergencia del retrieval con Nelder-Mead para $N_{CH_4} = s \cdot N_{CH_4}$

Como muestra la Tabla 4.1 nuestro código es apto para converger al valor óptimo del CH_4 en la atmósfera de Urano. Cabe destacar que la función de minimización no posee mínimos locales, ya que inicializándola en $s_0 = 1$ para el cual la correlación con el espectro sintético es $\chi^2 \sim 10^5$ alcanza el entorno de $s_f \approx 800$ en 23 evaluaciones, si bien es cierto que toma casi otras tantas para alcanzar la precisión deseada.

Otro problema de interés radica en estudiar la variación del flujo con la latitud en un rango espectral dominado únicamente por el CH_4 . En Sromovsky et al. (2014) este estudio se lleva a cabo con la banda de 1290 nm del metano, pero en este caso se ha elegido la región de 885 nm bajo la asunción de que los posibles efectos de aerosoles aún indeterminados serían equivalentes en ambas longitudes de onda, lo cual es factible por estar ambas en el IR cercano. Además, se muestra la gráfica de las transmitancias (Figura 4.5), que sirve para catalogar la región elegida como adecuada por la escasa intervención del H_2 en el espectro ($T_\lambda \approx 1$ para H_2 y CIA).

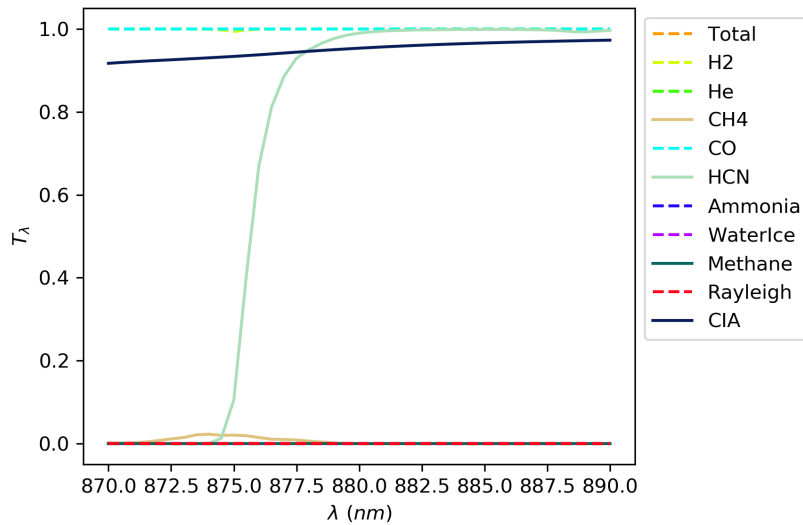


Figura 4.5: Transmitancia de los compuestos de la atmósfera de Urano entorno a la banda del CH_4 en 885 nm.

Como el PSG no tiene implementada la variación de metano por latitudes (recordemos que esta capacidad sí está implementada para las atmósferas de Marte o la Tierra), desde una misma posición de observación las regiones polares van a ser simuladas con la abundancia del CH_4 por defecto del PSG¹ y con y sin la nube de metano, ya que es posible que las nubes convectivas del Polo Norte estén formadas a partir de otro compuesto (Sromovsky et al., 2014). Por otro lado, para simular las regiones de latitudes bajas se multiplicará por un factor dos la abundancia mencionada, dejando la nube. En la Figura 4.6 se muestra cómo varía el flujo en la banda del CH_4 para cada uno de los casos.

Ciertamente, la Figura 4.6 muestra que con un factor 2 en la abundancia del CH_4 de las dos latitudes tratadas, se reproduce correctamente el orden de magnitud de la variación observada en Sromovsky et al. (2014) para el albedo geométrico en función de la latitud. Sin embargo, si se

¹En este caso, se está interesado en la abundancia relativa del CH_4 , no en la absoluta

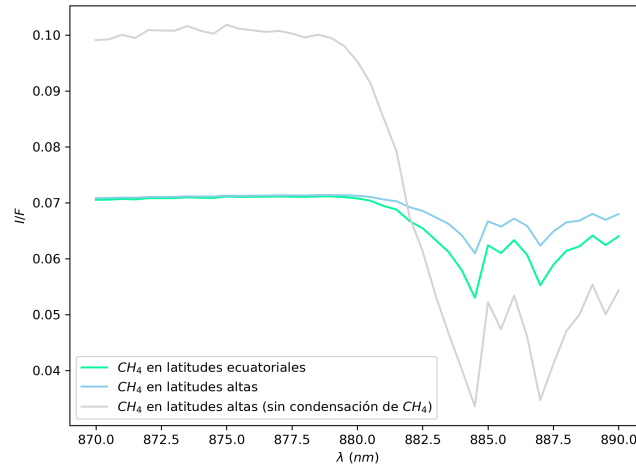


Figura 4.6: Banda del CH_4 de 885 nm en diferentes supuestos: latitudes ecuatoriales (verde), latitudes subpolares (azul) y latitudes subpolares sin condensación del metano. Resolución: 0.5 nm

elimina la nube de metano de transmitancia nula en todo el rango estudiado (ver Figura 4.5), la radiación se internará a más profundidad en la atmósfera hasta reflejarse en otras capas de aerosoles. En consecuencia, la banda del metano es más profunda y a su vez se observa menos extinción de radiación en el resto de longitudes de onda. Esto sugiere que si se descarta la condensación del metano en las regiones polares, surge la necesidad de introducir otro aerosol para ceñirse a las observaciones, es decir, para que la banda de CH_4 sea menos intensa. Por último, en el hipotético caso de que se implementase la variación latitudinal de CH_4 , y conociendo la geometría exacta de la observación, sería de esperar que el PSG fuera capaz de simular el brillo de la banda en cada latitud. De esta forma, al igual que en nuestra aproximación, se vería una caída de brillo en latitudes bajas como la de la Figura 7 de Sromovsky et al. (2014), difícil de explicar sin considerar una mayor proporción de CH_4 cerca del ecuador del planeta.

4.2. Banda de 15 μm del CO_2 en Marte

El CO_2 se encuentra en gran cantidad tanto en Venus como en Marte, y en pequeña proporción en la Tierra, donde durante la evolución atmosférica se sedimentó por procesos biológicos y geológicos. Desde esta experiencia, parece razonable pensar que numerosos exoplanetas de tipo rocoso pudieran albergar este compuesto, y que su abundancia pudiera estar relacionada con la evolución atmosférica. Además, este compuesto toma parte en lo que se conoce como el ratio C/O, que ya se emplea para estudiar la formación y evolución de exoplanetas (Deeg and Belmonte, 2018).

Una característica espectral relevante del CO_2 es su fuerte banda de absorción centrada en $\lambda_0 = 15 \mu\text{m}$ o $\nu_0 = 667 \text{ cm}^{-1}$, en el espectro térmico. Estudiando sus propiedades, y asumiendo condiciones de equilibrio, es posible obtener el perfil vertical de temperatura de la atmósfera (Sección 2.3). Esta banda es óptima para inferir la temperatura en los tres planetas mencionados: en Venus y Marte el CO_2 es el compuesto más abundante y es casi el único agente que determina la opacidad atmosférica en la región espectral mencionada, lo cual evita la degeneración; en la Tierra, el CO_2 no es más que un gas traza, pero como los compuestos mayoritarios (N_2 y O_2) son moléculas homopolares sin momento dipolar eléctrico, tanto el CO_2 como el H_2O dominan el IR (Hanel et al., 2003). Además, la concentración del CO_2 está bien definida para los tres planetas, con una distribución vertical casi constante en el tramo de la atmósfera de interés (Figura 4.8). Por estos motivos, el primer problema a tratar es precisamente el *retrieval* del perfil $T(P)$ a partir de la banda de 15 μm del CO_2 , mientras que después se realizará un estudio de dicha banda en dos situaciones características de Marte: las tormentas de polvo y el ciclo de volátiles. Antes de proceder, se hará una pequeña introducción de la atmósfera marciana.

4.2.1. Breve descripción de la atmósfera de Marte

La atmósfera marciana está compuesta principalmente por CO_2 , en aproximadamente un 96 %. Además, es muy tenue comparada con la de Venus y la Tierra, la presión superficial tan solo alcanza $P_s \approx 6 \text{ mbar}$ (North et al., 2014). Por tanto, la atmósfera marciana es bastante transparente a la radiación visible e infrarroja, aunque existen excepciones como la región espectral que trataremos en este proyecto. Al estar más lejos del Sol, Marte recibe menos radiación que la Tierra, y su temperatura de emisión efectiva es menor: $T_{eff} \approx 222 \text{ K}$, en Sanchez-Lavega (2011). El eje de rotación del planeta está inclinado en un ángulo de $i = 25.19^\circ$ respecto a su órbita (Williams, 2020), lo que produce un efecto estacional al igual que en la Tierra. Además, este fenómeno se acentúa en Marte debido a la excentricidad de su órbita: el notable aumento de la insolación en el hemisferio sur en su aproximación al Sol es la causa de las tormentas globales de polvo. En esa época, una mayor cantidad de radiación calienta la región atmosférica cercana a la superficie del planeta, generando una inestabilidad vertical que sobrepasa la que habitualmente contribuye a que exista una cantidad residual de polvo en la atmósfera (Mersmann, 2015). Cuando el aire caliente asciende por medio de dicho mecanismo eleva el polvo consigo. Cabe destacar que las tormentas de polvo son autolimitantes, ya que tal concentración de polvo en suspensión absorbe una porción de la radiación solar, contribuyendo a calentar la atmósfera y enfriar la superficie (Ver Figura 4.17). De esta forma, la estabilidad de las capas próximas a la superficie tiende a recuperarse, la velocidad de los vientos decrece y el polvo termina redepósito sobre la superficie al cabo de unas pocas semanas (North et al., 2014).

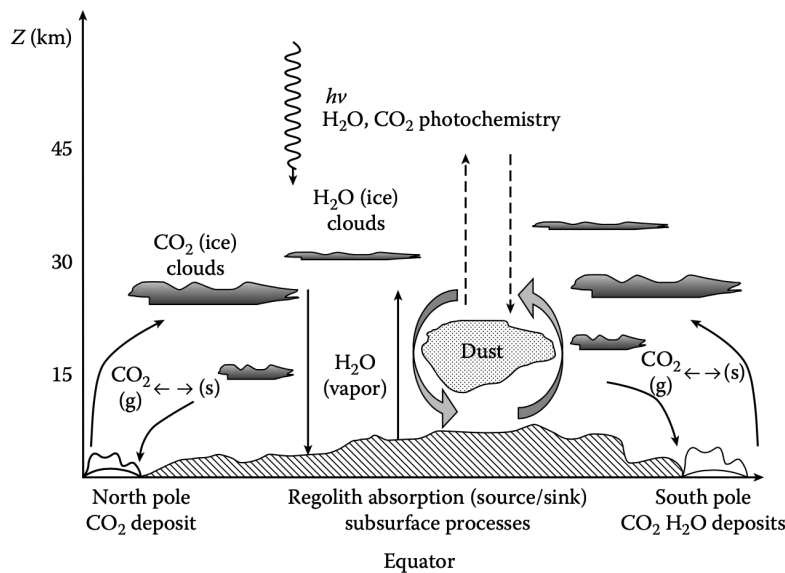


Figura 4.7: Ciclo y distribución vertical de volátiles y aerosoles en la atmósfera de Marte. Imagen tomada de Sanchez-Lavega (2011).

Otro fenómeno en el que están implicados el forzamiento radiativo y las estaciones es el ciclo de volátiles en Marte. En el polo sur existe un depósito permanente de hielo de CO_2 . Cuando es verano en el hemisferio sur, parte de dicho CO_2 sublima. Como consecuencia, la presión atmosférica de Marte aumenta apreciablemente (Jakosky et al., 2005) y la banda de 15 μm del CO_2 se podría ver afectada, lo que motiva la consideración de este fenómeno en el contexto del presente texto. Además, los gradientes de temperatura son el motor que acciona la dinámica atmosférica, que a su vez conduce a la redepósito del compuesto, cerrando el ciclo anual. El ciclo del H_2O es equivalente, aunque éste se sublima, principalmente, del polo norte (North et al., 2014). Dada la baja presión atmosférica, el CO_2 y el H_2O condensan en la atmósfera marciana como cristales de hielo, ya que estos no pueden estar en fase líquida. En la Figura 4.7 se recoge la distribución vertical y los ciclos de volátiles y aerosoles en Marte. Existe un acoplamiento entre el polvo y las nubes de CO_2 y H_2O , ya que aparte de aumentar la opacidad, el primero actúa como núcleo de condensación para los compuestos volátiles (Sanchez-Lavega, 2011).

Por último, el perfil vertical de temperatura es muy variable en Marte. Éste dependerá de la

región del planeta que se observa y de los efectos estacionales que padece, ya que la inercia térmica de Marte es muy pequeña. En cada caso se tiene un valor distinto para la reflectividad, la insolación y la distribución de aerosoles que alberga la atmósfera justo por encima, fruto de ello la opacidad de la atmósfera y la emisión térmica varían. No obstante, la atmósfera superior de Marte no posee una inversión térmica, al contrario que la terrestre (Figura 4.8).

4.2.2. Espectro térmico de los planetas rocosos

Como se ha expuesto en el Capítulo 2, la influencia del *scattering* puede ser hasta cierto punto ignorada en el espectro térmico, no así la absorción y emisión de los compuestos, que estarán ligadas a sus distribuciones verticales, $N(P)$, y al perfil vertical de temperatura, $T(P)$. Los espectros térmicos de referencia empleados para Venus, Tierra y Marte se pueden encontrar en Hanel et al. (2003) y corresponden a medidas realizadas en latitudes medias². Los tres espectros han sido reproducidos con el flujo en unidades de temperatura de brillo ($[T_B] = K$), que representa la temperatura que tendría un cuerpo negro en equilibrio térmico con su entorno emitiendo el mismo flujo que el cuerpo gris de emisividad ε observado. La temperatura efectiva de emisión del cuerpo gris, bien sea la superficie del planeta o la capa más profunda accesible de la atmósfera, es entonces:

$$T_{eff} = \frac{T_B}{\varepsilon} \quad (32)$$

Tanto la temperatura efectiva como la temperatura de brillo dependen de la opacidad de la atmósfera, y por tanto de la longitud de onda. Observando el espectro térmico en diferentes longitudes de onda se analiza la contribución a la intensidad total de distintos niveles de la atmósfera, ya que ésta es más opaca o más transparente y, la radiación recorre una distancia acorde con ello. Entonces, τ_λ determina la región atmosférica a la que somos sensibles. La emisión térmica va a depender de la temperatura del nivel efectivo de emisión, y en algunos casos de las capas atmosféricas colindantes (Ver Sección 2.3). Así es como a partir del espectro se puede inferir el perfil $T(P)$. Denotaremos por T'_B al valor de la intensidad en el continuo, asociado con la capa atmosférica más profunda accesible. En la Figura 4.8, se muestra el espectro térmico de los tres planetas mencionados junto con su perfil vertical de temperatura.

La Figura 4.8 muestra que la banda del CO_2 a 15 μm es profunda incluso en el caso de la Tierra, donde dicho compuesto no es muy abundante. Además, la inversión térmica en la parte superior de la atmósfera terrestre se manifiesta en la emisión que aparece en la parte central de dicha banda. Esta propiedad detectada con la banda de 15 μm también es de interés para las exo-atmósferas (Deeg and Belmonte, 2018). Por otro lado, la zona central de la banda parece tener una línea de absorción característica en el caso de Marte. Este fenómeno, que no se observa en Venus, podría deberse a que para un espesor óptico moderado (como el de la tenue atmósfera marciana), la profundidad de línea en la parte central de la banda depende de la densidad de toda la columna de CO_2 , ya que muy pocas moléculas están apantalladas por otras en la línea de visión y por tanto casi todas contribuyen a la opacidad (Hanel et al., 2003). En Venus, por su parte, existe ensanchamiento por presión de la banda mencionada, amén de absorciones del CO_2 inducidas por colisión repartidas por la región $\nu > 800 \text{ cm}^{-1}$. Otro resultado de interés del espectro de Marte es que el polvo se pronuncia en distintos grados en todo el rango estudiado (Hanel et al., 1972), absorbiendo significativamente en la región comprendida entre 900 cm^{-1} y 1200 cm^{-1} . En contraste, este aerosol destaca en menor medida en la banda de 15 μm , ampliamente dominada por el CO_2 . Por último, se distingue la acción de otros compuestos sobre los espectros de Marte y la Tierra: absorción de nubes de cristales de H_2O (Figura 4.17 B) y débiles bandas de vapor del mismo compuesto, en Marte; fuertes bandas de absorción de H_2O y O_3 en el caso de la Tierra, dejando ventanas³ a la superficie únicamente en los intervalos de $780 - 1000 \text{ cm}^{-1}$ y $1080 - 1240 \text{ cm}^{-1}$ (Hanel et al., 2003), etc.

Para analizar si la intensidad observada proviene de la superficie, en la Tabla 4.2 se muestra la temperatura efectiva de emisión de la capa más profunda accesible para los tres cuerpos mediante la introducción de T'_B en la Ecuación 32, frente a la temperatura de equilibrio de los planetas

²En el caso de la Tierra y Marte existe una variabilidad espectral importante entre ecuador y polos, por tener distinto albedo, y entre regiones nubosas y despejadas, donde el espesor óptico cambia apreciablemente

³Estas ventanas del IR sólo se dan en ausencia de nubes

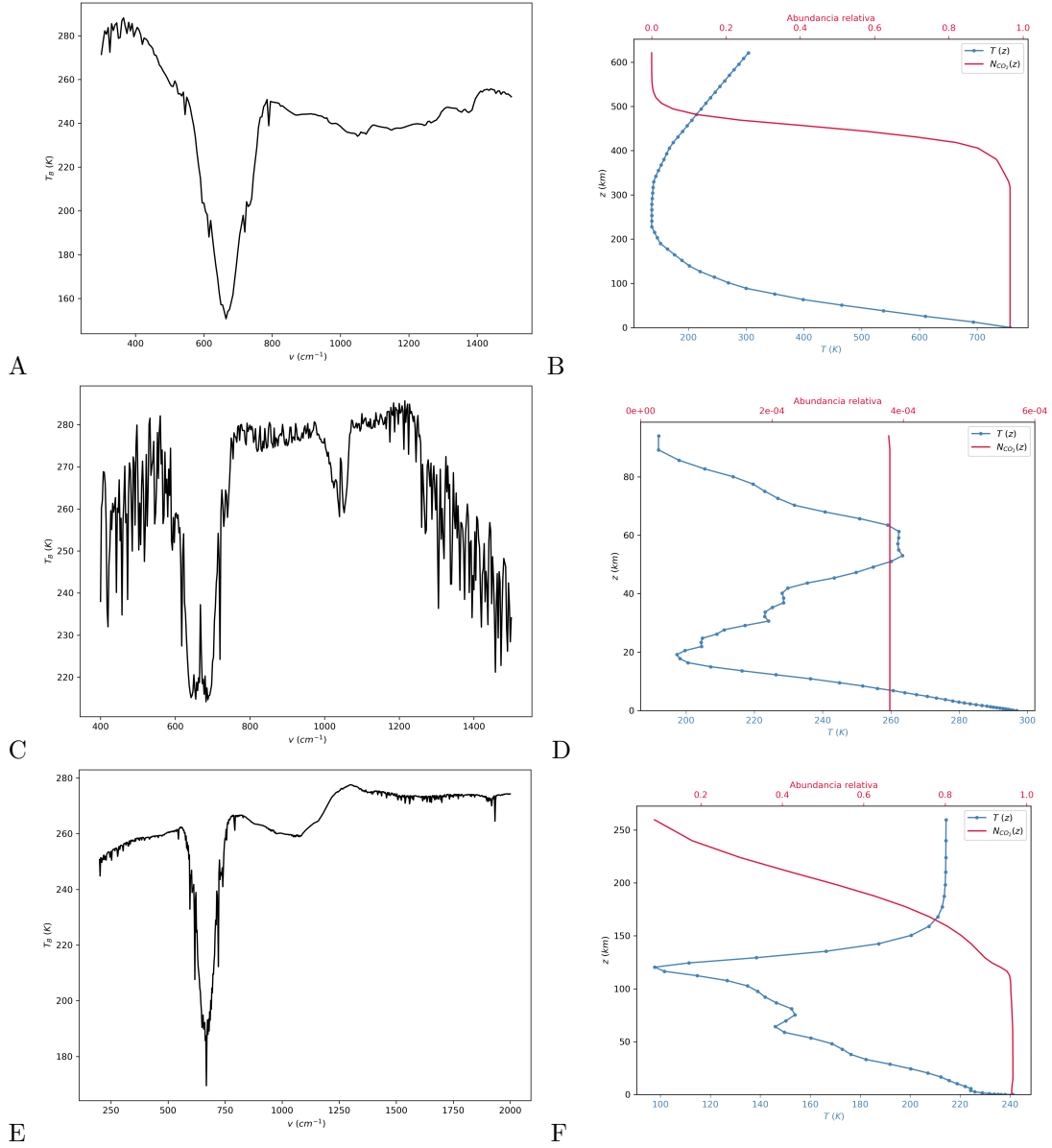


Figura 4.8: Las figuras (A,C,E) muestran los espectros térmicos generados en PSG de Venus, Tierra y Marte respectivamente. El rango y la resolución espectral en cada caso concuerdan con los de Hanel et al. (2003) pero la banda de 15 μm ($\nu_0 = 667 \text{ cm}^{-1}$) del CO_2 es un elemento común en todos ellos. A su lado, (B,D,F) representan los perfiles verticales de temperatura, $T(z)$, en sus atmósferas.

tomada de Sanchez-Lavega (2011)⁴ y las temperaturas superficiales que aparecen en PSG.

Cuerpo	T'_B (K)	$T_{eq,ref}$ (K)	ε	T_{eff} (K)	$T_{sup,ref}$ (K)
Venus	245	238	0.78	314	756
Tierra	290	263	0.9	322	297
Marte	272	222	0.86*	316	289.5

Tabla 4.2: Temperaturas de las atmósferas de Venus, Tierra y Marte

⁴Se asume equilibrio radiativo y $\varepsilon = 1$

Cabe destacar que la naturaleza de la temperatura de brillo es relacionar la radiancia con la emisión de un cuerpo negro, no teniendo un significado físico de temperatura como tal. Aún así, esta magnitud permite aproximar en algunos casos la temperatura superficial de un cuerpo (Ecuación 32). Por su parte, la temperatura de equilibrio surge de asumir balance radiativo en el planeta, situación en la que toda la radiación incidente es reemitida⁵. Al mismo tiempo, esta hipótesis desprecia el efecto invernadero y las fuentes internas de energía. En el caso de Venus, la T'_B (K) hallada en PSG, asociada al continuo de la emisión de un cuerpo negro, difiere tan solo en un 3% de la temperatura de equilibrio del planeta, calculada en Sanchez-Lavega (2011)⁶. Sin embargo, la opacidad de su atmósfera es tal que la contribución de la superficie en el espectro térmico está enteramente eclipsada, y la temperatura de equilibrio corresponde a las capas accesibles de su atmósfera. En el caso de la Tierra, $T'_B \approx 290 K$ corresponde a la temperatura regional sobre el continente de América del Sur el 15 de septiembre de 2018 a las 17:00 horas UT, mientras que $T_{eq,ref} \approx 263 K$ es una temperatura media global en superficie, que es necesariamente menor porque no contempla el efecto invernadero. En Marte la abundancia de CO_2 en la atmósfera, el albedo y el perfil $T(P)$ varían ostensiblemente, lo que introduce una incertidumbre mayor que en los otros dos cuerpos a la hora de inferir la temperatura de equilibrio, como se ve en la segunda y tercera columna en la Tabla 4.2). La llamativa diferencia y la ‘alta’ temperatura superficial para Marte se deben a que el modelo marciano empleado está centrado en una región de latitudes medias del hemisferio sur en el momento de acercamiento de Marte a su perihelio, y más concretamente en la fase de día. La escasa atmósfera de Marte favorece una constante de tiempo radiativo pequeño, es decir, la energía solar recibida causa variaciones apreciables en el planeta en cuestión de horas. Es por esto que la diferencia de temperatura superficial en las caras de día y noche es muy acusada en Marte, yendo desde 120 K en los polos, hasta 293 K en el medio día de verano en el ecuador (James, 2001). Por lo que se ha visto en la Sección 2.3, en el caso de Marte la intensidad emitida en el continuo va a fluctuar de forma significativa, pudiendo la banda de 15 μm del CO_2 aparecer incluso en emisión si $T_{atm} > T_{sup}$ en alguna región.

La temperatura efectiva de cuerpo gris calculada a partir del PSG no se muestra más resolutive para determinar la temperatura en superficie (Ver últimas dos columnas en la Tabla 4.2). Mientras que en el caso de Marte podría considerarse un resultado aceptable, dentro del marco de su variabilidad, la alta opacidad de la atmósfera de Venus ‘apaga’ completamente la contribución de la superficie en el espectro emitido y por tanto, la temperatura efectiva de emisión corresponde nuevamente a un nivel más alto en la atmósfera. En el caso de la Tierra, la temperatura superficial es menor que la temperatura efectiva de emisión de cuerpo gris, y la discrepancia sería aún mayor en regiones con $\varepsilon = 0.70$ (regiones nubosas o heladas, por ejemplo). Esto sugiere que para sustentar la intensidad saliente detectada en el continuo no basta con la emisión de la superficie, sino que además es necesaria la contribución de varios niveles de la atmósfera. Además, la Tierra contiene una fuente interna de calor, otro factor que aumenta la emisión térmica del planeta por encima de la asumible considerando únicamente la aportación de la superficie.

Una vez comprendida la aplicación del análisis espectral a la hora de caracterizar la estructura térmica de las atmósferas, se va a centrar la atención sobre la banda de 15 μm del CO_2 para intentar inferir el perfil vertical de temperatura en Marte.

4.2.3. *retrieval* de $T(P)$ en Marte

En lo sucesivo se analiza el problema inverso del *retrieval* de $T(z)$ ⁷ partiendo de un modelo generado en PSG para la emisión térmica de Marte centrada en la banda de 15 μm del CO_2 . Se ha variado la época de observación para contar con mayor diversidad de ejemplos. En primera instancia el polvo ha sido despreciado en este modelo de la atmósfera marciana. Por su parte, el ruido espectral irá entrando en juego sobre la marcha, ya que el fin último de este apartado es analizar la idoneidad del PSG para recuperar el perfil vertical de temperatura a partir de observaciones ruidosas. La Figura 4.9 muestra las consecuencias sobre el espectro de elevar y disminuir en 5 grados todo el perfil $T(z)$.

⁵Para describir la reemisión se suele utilizar la aproximación de cuerpo negro

⁶Notar que en ambos casos $\varepsilon = 1$

⁷A partir de ahora se emplea la notación $T(z)$. Como Marte es un cuerpo con una superficie, es más apropiado indicar la altura de cada nivel en kilómetros en lugar de escribir el correspondiente valor en términos de la presión.

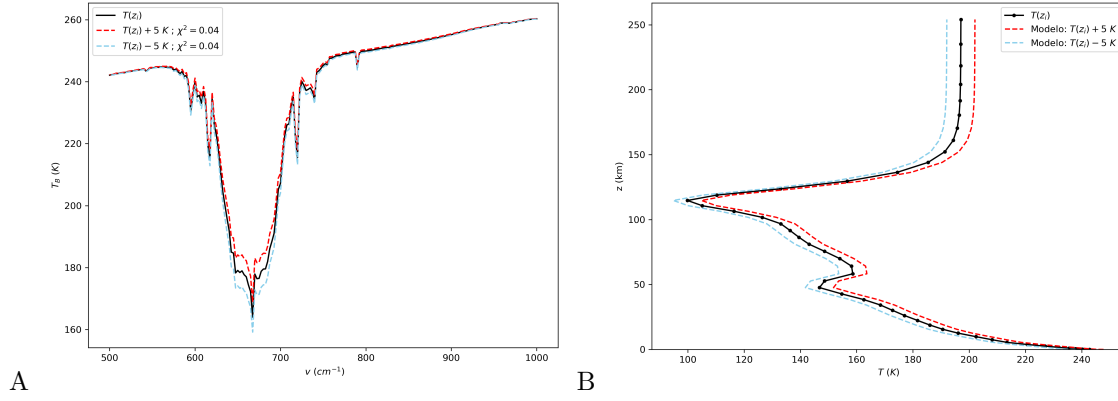


Figura 4.9: Comparación del espectro térmico de Marte en la región de la banda de $15 \mu\text{m}$ del CO_2 (A) para tres perfiles $T(z)$ diferentes (B). Se ha tomado la situación original (en negro) y se ha variado el perfil vertical en $\Delta T(z_i) \pm 5 \text{ K}$. En rojo se recoge el resultado de aumentar la temperatura y en azul el de disminuirla.

La principal diferencia en los tres espectros de la Figura 4.9 reside en la parte central de la banda, donde la opacidad de la atmósfera es mayor. Allí, la contribución de la atmósfera a la radiación térmica se impone sobre la de la superficie, y es donde más sensibilidad existe a las variaciones de temperatura impuestas en los modelos. De esta forma, un aumento de temperatura tiende a menguar la profundidad de la banda del CO_2 porque se reduce la diferencia de temperatura entre la capa de emisión efectiva y la superficie. Lo contrario sucede al reducir la temperatura en todos los niveles. Nótese que en unidades de temperatura de brillo, la profundidad de la banda varía en cada caso de acuerdo con la diferencia de temperatura que se ha asignado. Esto implica que en el presente modelo del PSG es razonable asumir que las capas de la atmósfera marciana están emitiendo como un cuerpo negro perfecto.

Hasta ahora, el cambio realizado en el perfil $T(z)$ ha sido de alguna forma conservador, puramente ilustrativo. Sin embargo, el código escrito nos permite estudiar los dos casos particulares expuestos en la Sección 2.3: el espectro térmico de una atmósfera isoterma y el de una atmósfera con un gradiente vertical de temperatura constante entre la superficie y el nivel donde la temperatura es mínima. La motivación de esta última elección es que en esa región vertical se concentra la mayor parte de la materia y por tanto, donde el espectro es más sensible a variaciones en el perfil $T(z)$. Además, nuestra descripción del gradiente constante permitiría aligerar la búsqueda del mínimo de temperatura en la atmósfera, ya que se puede partir de una temperatura más próxima.

Atmósfera isoterma

En todos los casos, las observaciones sintéticas se han generado introduciendo un ruido aleatorio del 5% al modelo dibujado en negro⁸ en la Figura 4.9 A. En unidades de temperatura de brillo este es un ruido cuanto menos generoso, pero el exceso está justificado por su interés pedagógico. El primer *retrieval* del perfil de temperatura sobre un espectro observado se va a inicializar con un modelo cuya atmósfera es isoterma. La Figura 4.10 muestra las observaciones sintéticas de partida frente a los espectros térmicos para atmósferas isotermas a $T_1 = 150\text{ K}$ y $T_2 = 210\text{ K}$, que es la ‘temperatura atmosférica’ del planeta aceptada por el PSG.

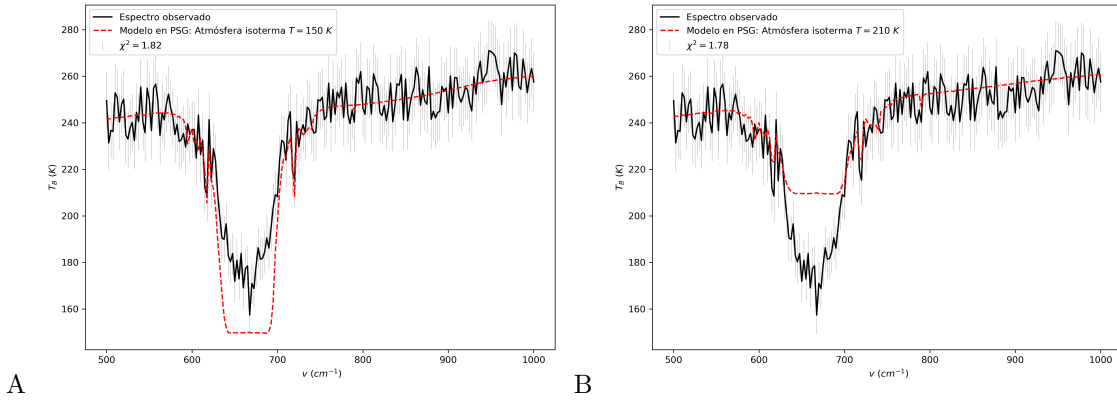


Figura 4.10: Observaciones sintéticas frente a espectros generados en PSG para una atmósfera isoterma a (A) $T_1 = 150\text{ K}$ y (B) $T_2 = 210\text{ K}$. Las barras de error aparecen en gris. Resolución: $\Delta\nu = 2.5\text{ cm}^{-1}$.

Tal y como se relata en la Sección 2.3, la parte central de la banda en la Figura 4.10 se satura en el caso de atmósferas isotermas. Nuevamente, en dicha región espectral, la opacidad de la atmósfera es tal que se pierde toda sensibilidad al contraste de temperatura entre la atmósfera y la superficie. En cada caso, la banda satura en la temperatura de brillo correspondiente a la temperatura de equilibrio asignada a la atmósfera. Partiendo de estas condiciones iniciales, es posible lanzar un *retrieval* del perfil $T(z)$ donde cada uno de los niveles verticales definidos en PSG para la atmósfera de Marte es un parámetro, en total 49. Como se ha indicado con anterioridad, una de las ventajas de la herramienta de *retrieval* del PSG es su capacidad para calcular la incertidumbre de los parámetros, que se muestra junto con los valores obtenidos para los mismos. Para el primer caso (atmósfera isoterma a $T = 150\text{ K}$) va a presentarse en la Figura 4.11 el resultado del *retrieval* con dos inicializaciones: el espectro observado que se está empleando y un espectro inicial que será el mismo pero sin ruido (en negro en la Figura 4.9).

⁸de ahora en adelante espectro observado

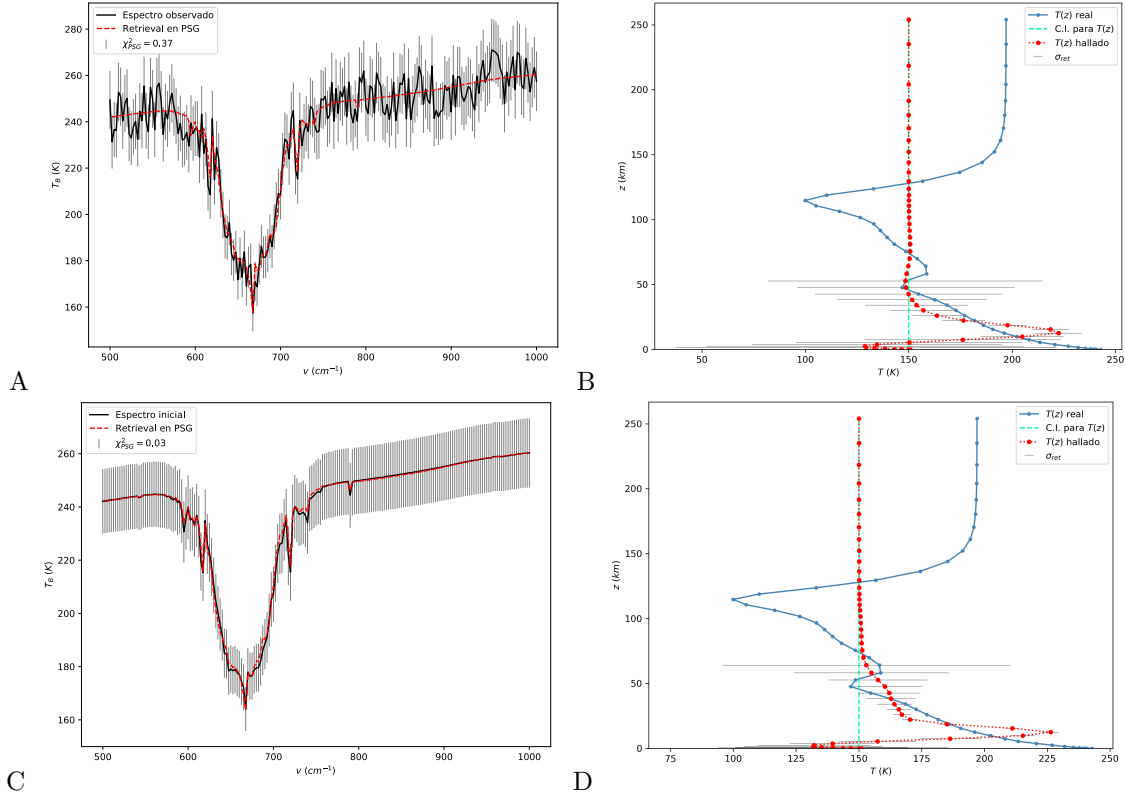


Figura 4.11: (A) Ajuste del espectro observado (en negro) con el espectro proveniente del retrieval con una atmósfera isoterma a $T = 150\text{ K}$ (en rojo). (C) Igual que (A) pero el espectro inicial no tiene ruido aleatorio. (B) y (D) son las soluciones de la inicialización con y sin ruido respectivamente, y presentan tres perfiles verticales de temperatura que incluyen el real con el que se han generado las observaciones (en azul), las condiciones iniciales (en verde) y los valores del retrieval de $T(z)$ (en rojo). Además, el resultado del retrieval va acompañado de su incertidumbre cuando ésta es relevante.

La Figura 4.11 muestra la capacidad de la herramienta de *retrieval* del PSG para inferir un perfil $T(z)$ que permite recuperar el espectro observado, incluso a partir de los modelos de la Figura 4.10. Este proceso se ha completado a pesar de haber introducido un ruido aleatorio, aunque en la Figura 4.11 B puede apreciarse que en ese caso las incertidumbres en $T(z)$ son mayores que en el caso análogo sin ruido (Figura 4.11 D). Sin embargo, es obvio que con la inicialización de una atmósfera isoterma a $T = 150\text{ K}$ de ninguna manera se obtiene el perfil $T(z)$ real. Por ejemplo, la inversión térmica a la que ambos *retrieval* dan lugar en la parte baja de la atmósfera no debe ser interpretada como tal, sino que es el resultado de una combinación entre nuestra imprecisa inicialización en $T = 150\text{ K}$ y una menor sensibilidad a las capas atmosféricas inmediatamente por encima de la superficie. Como ya se ha apuntado, el espectro térmico está proporcionando especial sensibilidad a la atmósfera inferior, pero no necesariamente a los niveles más próximos a la superficie. Todo esto se traduce en las barras de error dibujadas en la Figura 4.11 B y D. Las regiones donde éstas no han sido incluidas poseen incertidumbres que exceden los límites del gráfico.

La incertidumbre en cada parámetro resulta de utilidad para definir la sensibilidad del espectro al perfil $T(z)$, y así estudiar la región atmosférica a la que existe una mayor sensibilidad en el problema de *retrieval*. Definiendo capa a capa la sensibilidad del modelo como

$$S = \frac{T_{ret}(z_i)}{\Delta T(z_i)} \quad (33)$$

es posible dibujar esta magnitud frente a la altura:

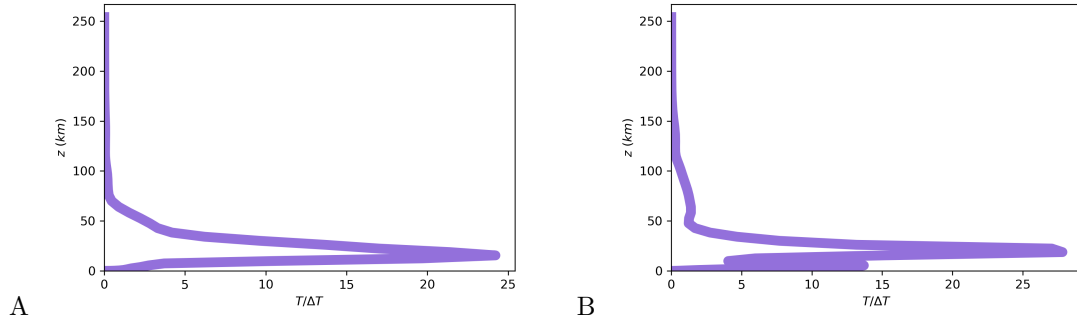


Figura 4.12: Sensibilidad del retrieval a la temperatura de los diferentes niveles de la atmósfera de Marte, para una inicialización con observaciones ruidosas y (A) $T_{atm} = 150 \text{ K}$; (B) $T_{atm} = 210 \text{ K}$.

Tal y como se ha definido la sensibilidad en la Ecuación 33 si es próxima a 0 indicará que la incertidumbre de la temperatura en ese nivel vertical es muy grande. Como era de esperar, la mayor contribución al espectro térmico marciano proviene de la atmósfera inferior, a unos 20 km de altura (Figura 4.12 A), pero al mismo tiempo no somos demasiado sensibles a los niveles inmediatamente por encima de la superficie.

Para dar por concluido este apartado, en la Figura 4.13 se expone el resultado de lanzar un *retrieval* con el modelo de atmósfera isoterma a $T = 210 \text{ K}$.

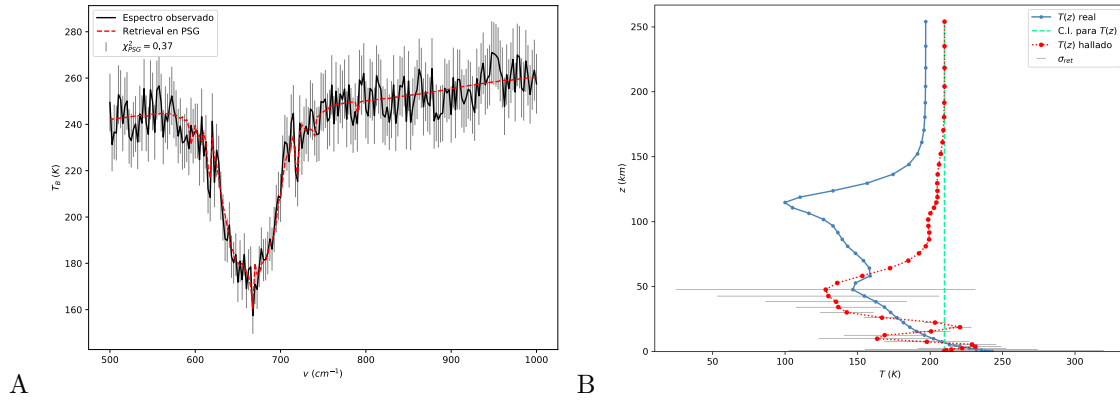


Figura 4.13: (A) Ajuste del espectro observado (en negro) con el espectro proveniente del retrieval (en rojo) con una atmósfera isoterma a $T = 210 \text{ K}$ como condiciones iniciales; (B) retrieval del perfil $T(z)$.

Al contrario que en el caso anterior, el modelo de la atmósfera isoterma a $T = 210 \text{ K}$ se ve forzado a reducir el valor de la temperatura en la atmósfera inferior (Figura 4.13 B) para ser capaz de reproducir el espectro observado. Por otro lado, las barras de error son comparables en orden de magnitud a las del caso anterior para el espectro ruidoso, pero la sensibilidad cambia ligeramente en el entorno de 50 km y en niveles próximos a la superficie (Figura 4.12 B).

$dT/dz = \text{Cte}$

Como se menciona en la Sección 2.3, otra aproximación de interés para los perfiles $T(z)$ en las atmósferas es la del gradiente vertical de temperatura constante. Hasta ahora, el mínimo de temperatura no ha sido reproducido por los *retrieval* de $T(z)$. En el caso de Marte, esto no se debe tanto a la dificultad del problema inverso en el entorno del mínimo de temperatura, expuesta en la sección mencionada, sino que directamente no hay sensibilidad a la región atmosférica donde se localiza el mínimo. Sea como sea, para esquivar los problemas que podrían emerger si por ejemplo estudiásemos el perfil $T(z)$ de la Tierra, donde el mínimo de temperatura cae en el entorno de la

tropopausa (Figura 4.8), se ha escrito un código en Python que aproxima el perfil $T(z)$ por un gradiente constante de temperatura entre la temperatura superficial y la temperatura mínima de la atmósfera. Con este modelo como inicialización, la herramienta de *retrieval* del PSG halla la solución mostrada en la Figura 4.14.

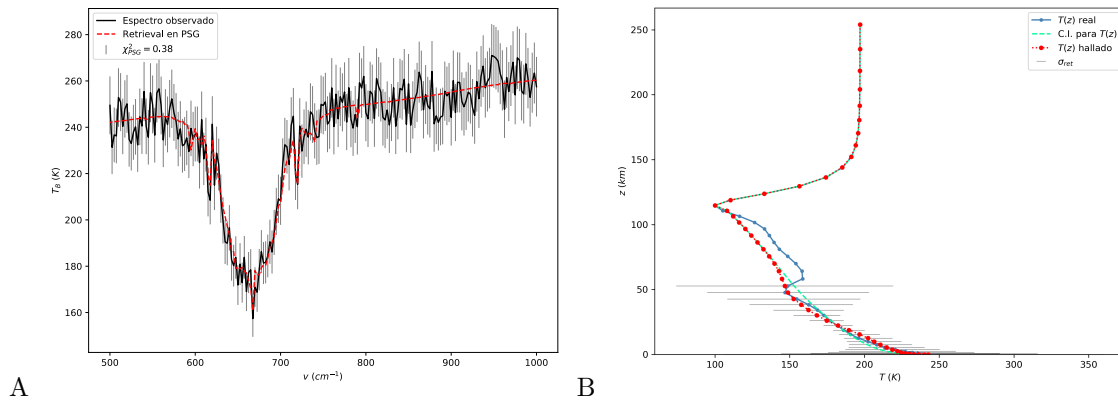


Figura 4.14: (A) Ajuste del espectro observado (en negro) con el espectro proveniente del *retrieval* (en rojo) con una atmósfera inferior tal que $dT/dz = Cte$ como condición inicial; (B) *retrieval* del perfil $T(z)$. En verde se presenta la aproximación empleada.

Con este modelo de partida más realista para la atmósfera marciana, la sensibilidad a la temperatura de los niveles bajos mejora perceptiblemente (Ver Figura 4.15), con la subsiguiente disminución de las barras de error en la Figura 4.14 B. Sin embargo, el ‘a priori’ estaba tan cerca del perfil nominal que esto no se puede considerar un resultado relevante. Comúnmente, cuando la solución no es conocida, se suele aplicar una técnica llamada ‘bracketing’ que consiste en probar diferentes temperaturas a $z = 0$ y diferentes gradientes como puntos de partida. Por otra parte, la sensibilidad a la atmósfera superior sigue siendo más que pobre, así que el *retrieval* devuelve los valores ‘a priori’ introducidos. En previsión de esto, ni siquiera se han invertido esfuerzos en variar el $T(z)$ de dicha región espacial, ya que no es posible realizar un análisis de resultados en esas condiciones.

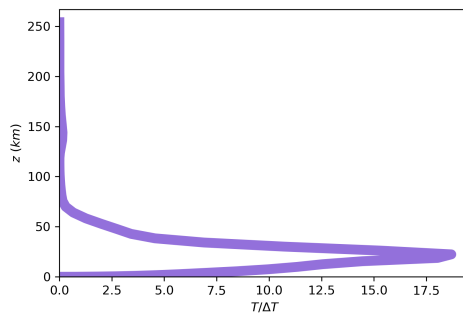


Figura 4.15: Sensibilidad del *retrieval* a la temperatura de los diferentes niveles de la atmósfera de Marte para una inicialización con $dT/dz = Cte$ por debajo del mínimo de temperatura.

Contando con la idoneidad de este último modelo para aproximar el perfil $T(z)$, se procede a estudiar la banda de 15 μm durante la gran tormenta de polvo de 2018.

Tormenta de polvo

El 1 de Julio de 2018 la superficie de Marte estaba completamente cubierta por una tormenta global de polvo (Guzewich et al., 2019; Sánchez-Lavega et al., 2019). Se ha generado en la interfaz del PSG un modelo de atmósfera marciana apropiado para la ocasión. Para ello, se hace uso de una plantilla específicamente testada y cualificada para reproducir el periodo de la tormenta de polvo: “MARS-GEM Circulation Model”. Si se carga este modelo en el campo donde se configura

la atmósfera, se obtiene el siguiente perfil vertical para la temperatura y el polvo en la región observada (14°S 142°E), además de una temperatura en superficie de $T_{sup} \approx 249$ (Mucho más baja que la de la Tabla 4.2):

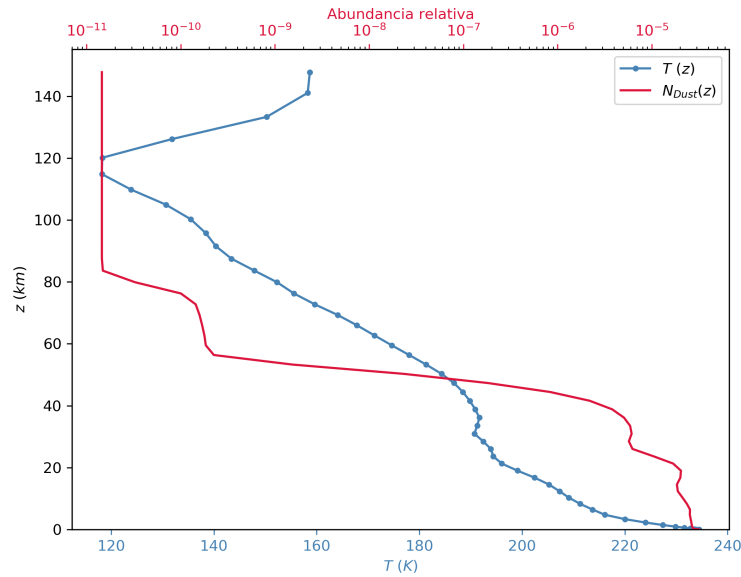


Figura 4.16: Perfil vertical de temperatura en Marte moldeado por la distribución vertical del polvo durante la tormenta global de polvo de 2018.

La Figura 4.16 aglutina el perfil vertical del polvo y el perfil $T(z)$ para ilustrar la relación entre ellos. Notar que en este caso, PSG prácticamente sólo define los niveles de la atmósfera de Marte por debajo del mínimo de temperatura a 120 km. Tal y como se explica en la Subsección 4.2.1, el polvo absorbe una parte de la radiación solar en el espectro visible e IR cercano. Esta energía contribuye a un calentamiento de la atmósfera en los niveles donde reside el polvo, tal y como muestra la Figura 4.16. Al mismo tiempo, la temperatura superficial decrece porque incide menos radiación. Análogamente, las nubes de cristales de hielo de H_2O en Marte también producen una disminución en la temperatura superficial por medio de un aumento en la reflectividad de su atmósfera (Hanel et al., 2003).

Por otro lado, antes de lanzar el *retrieval*, es interesante ver cómo varía la región espectral alrededor de la banda de 15 μm del CO_2 en manos del polvo. Se comienza comparando el modelo generado en PSG consigo mismo, pero eliminando el polvo. En ambos casos, el ruido se desprecia. Además, el perfil $T(z)$ de la Figura 4.16 no tendría sentido en ausencia de polvo, así que para simular dicha situación se emplea nuevamente la aproximación del gradiente dT/dz constante entre el nivel más próximo a la superficie y el nivel donde la temperatura es mínima. La Figura 4.17 muestra la comparativa de los espectros junto con la transmitancia de los compuestos en el modelo que incluye el polvo.

Como ya se ha visto en la Figura 4.8, el polvo posee influencia en todo el espectro térmico, aunque la región de $\nu_0 = 667 \text{ cm}^{-1}$ está dominada por la banda del dióxido de carbono. Esto puede verse en la transmitancia total dibujada en la Figura 4.17 B, de la que el polvo y el CO_2 son los grandes artífices. La presencia del polvo reduce la transmitancia a lo largo de todo el rango espectral, salvo en la parte central de la banda del CO_2 donde la transmitancia total ya es nula. En cambio, la parte central de la banda acusa la menor temperatura atmosférica que se tiene en ausencia de polvo, así que indirectamente la presencia del polvo también acaba modulando la profundidad de dicha banda. En otro orden de ideas, la pendiente del continuo en 550 cm^{-1} y $800 - 1000 \text{ cm}^{-1}$ se aplana en presencia del polvo, ya que éste cubre completamente la superficie, de tal forma que el espectro es menos sensible al contraste de temperatura entre ésta y los distintos niveles. En resumidas cuentas, el polvo absorbe parte de la radiación térmica emitida por la superficie del planeta, así como la radiación del sol. La superficie se enfría como consecuencia de recibir menos energía, mientras que la temperatura de la atmósfera aumenta (Figura 4.16). Por

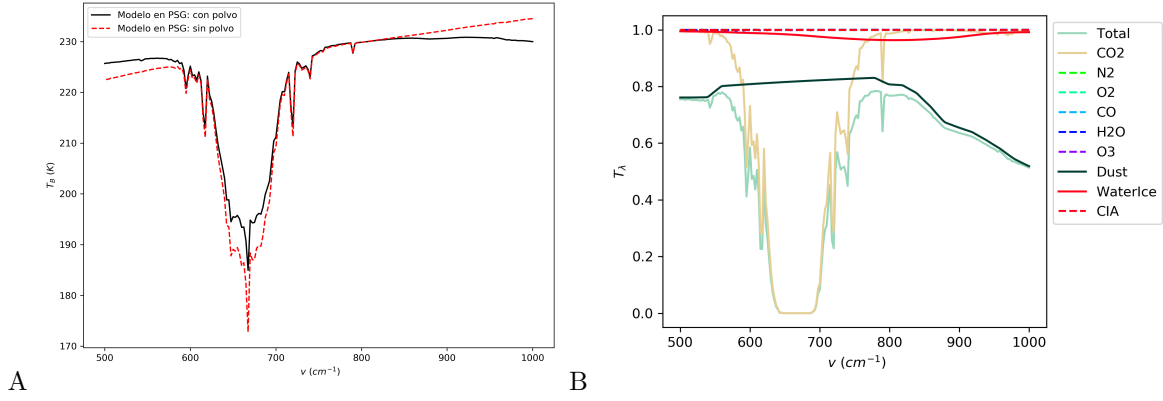


Figura 4.17: (A) Espectros de Marte entorno a la banda de 15 μm generados en PSG para dos situaciones: el máximo de la tormenta de polvo (en negro) y una atmósfera sin polvo (en rojo) y en consiguiente con un perfil $T(z)$ aproximado por $dT/dz = \text{Cte.}$ (B) Transmitancia de la atmósfera de Marte en el modelo que incorpora el polvo.

todo ello, la profundidad de la banda del CO_2 disminuye (Figura 4.17 A). Cuanto mayor es la cantidad de polvo en la atmósfera, más acusados son estos efectos.

Finalmente, se lanza un *retrieval* en PSG para estudiar las capacidades de obtener el perfil $T(z)$ de Marte en condiciones de tormenta global de polvo. Para ello, se contará con unas observaciones sintéticas (espectro negro de la Figura 4.17 A con ruido aleatorio) y unas condiciones iniciales que no sólo abarcaran el perfil $T(z)$, sino que la abundancia del polvo también será un parámetro en el problema inverso. Sin embargo, es crucial puntualizar que el PSG no puede implementar los cambios pertinentes en el perfil de $T(z)$ como consecuencia de variar la abundancia del polvo, y que por lo tanto la determinación de la abundancia del polvo con esta parametrización simultánea no es representativa. El perfil $T(z)$ ‘a priori’ se toma de la aproximación de gradiente constante (Ver Figura 4.14 B en verde), mientras que los niveles más altos de la atmósfera, que no influyen en el problema, se han omitido por requerimiento del PSG de reducir el número de parámetros. El parámetro de escala del polvo se ha inicializado en $s = 0.5$; aunque el valor nominal, que se conoce por contar con observaciones sintéticas generadas con modelos propios, es de $s_0 = 1.0$, se ha obtenido $s_f = 1.7 \pm 0.3$ debido al acoplamiento del polvo con el perfil vertical de temperatura. Los valores hallados para éste último se representan en la Figura 4.18 B.

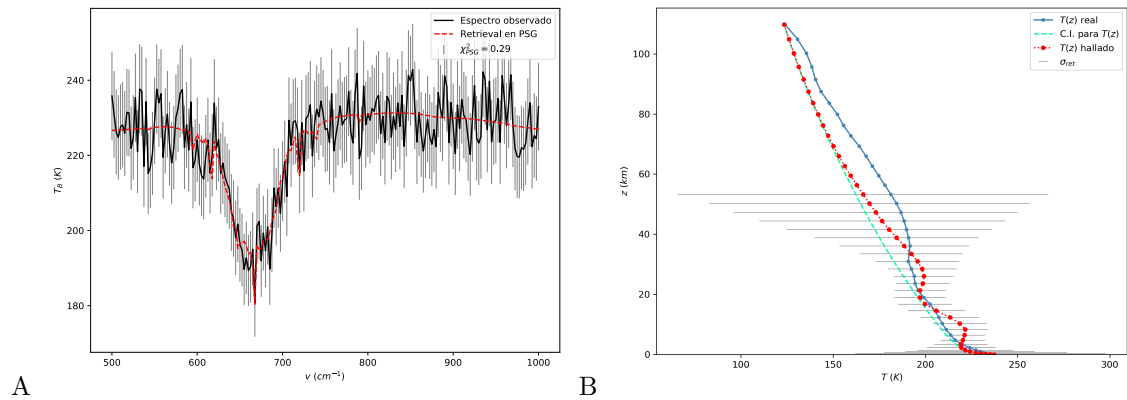


Figura 4.18: (A) Ajuste del espectro observado (en negro) con el espectro proveniente del retrieval (en rojo) con una atmósfera inferior tal que $dT/dz = \text{Cte}$ como condiciones iniciales; (B) retrieval del perfil $T(z)$. En verde la aproximación empleada.

En este caso, el *retrieval* del $T(z)$ emplea más niveles verticales para estudiar la región atmosférica de interés. En la Figura 4.18 B, por debajo de 40 km se han inferido dos regiones que dan buena cuenta del calentamiento de la atmósfera a causa del polvo, en consonancia con lo esperado al contemplar la distribución vertical del polvo en la Figura 4.16. La sobredimensión de este

calentamiento es inevitable, que no preocupante, ya que está vinculada a dos factores: el ruido aleatorio y el acoplamiento del perfil $T(z)$ con la abundancia del polvo, que está algo sobredimensionada. Potencialmente, el incremento de temperatura que se observa por encima de 40 km en el caso del perfil $T(z)$ real en comparación con la aproximación de gradiente constante, y que el *retrieval* no refleja, podría ser a causa de un tercer factor que provoca dicha sobredimensión. Esto mismo se ve en el modelo de la Figura 4.14 B, aunque en dicho caso la sensibilidad a los niveles verticales en cuestión es menor. La Figura 4.16 no parece un argumento a favor de la candidatura del polvo como principal agente productor de calentamiento en la región comprendida entre 60 y 100 km (Notad que la abundancia está en escala logarítmica en dicha figura). Más bien, atendiendo a la distribución vertical de todos los compuestos, el incremento de temperatura por encima de 50 km puede serle atribuido al CO_2 o al O_3 (Prabhakara and Hogan Jr, 1965). Como en el caso de la Tierra una porción de la radiación UV es absorbida por este último compuesto, con la salvedad de que en Marte no conduce a una inversión térmica.

La tormenta global de polvo ocultó la superficie marciana en las fechas (Sánchez-Lavega et al., 2019) y longitudes de onda consideradas (Figura 4.17 A). A su vez, la extensión vertical del polvo fue de unos 40 km con una distribución casi homogénea (Figura 4.16). Atendiendo a la sensibilidad del perfil $T(z)$ en la Figura 4.19, parece acertado pensar en la contribución a la intensidad del continuo de múltiples capas de la región inferior entorno a 10 km, donde antes no había tanta sensibilidad a la temperatura y que da lugar al lóbulo inferior de la Figura 4.18 B. Por su parte, los niveles que están por encima a unos 20-40 km, serían responsables de la intensidad observada en el centro de la banda de 15 μm .

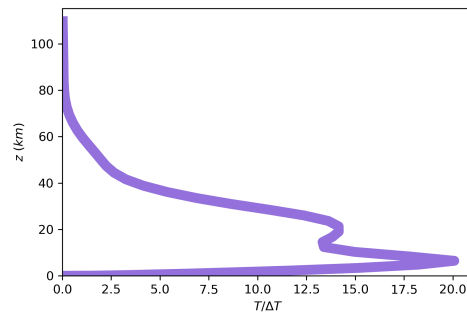


Figura 4.19: Sensibilidad del modelo a la temperatura de los diferentes niveles de la atmósfera de Marte durante la tormenta global de polvo.

En conclusión, el polvo, y en general los aerosoles, son agentes que modifican el equilibrio térmico de los diversos niveles atmosféricos. A su vez, como la opacidad de las capas de aerosoles depende suavemente de la longitud de onda, las ventanas a la superficie pueden quedar ocultas a partir de una cierta densidad del compuesto. Por ello, los aerosoles suponen un obstáculo en el estudio de los niveles bajos a partir de un espectro emitido. Por otro lado, durante la tormenta global de polvo, y con la relación señal/ruido (S/N) tratada en este proyecto, el ruido aleatorio es distinguible del efecto producido por el polvo en el espectro. Sin embargo, bien en situaciones de menor cantidad de polvo en suspensión, bien en aquellos problemas donde la relación S/N es crítica (en exoatmósferas, por ejemplo), estos dos rasgos podrían llegar a confundirse.

Ciclo de volátiles

Siguiendo por el derrotero de analizar los fenómenos de Marte que modifican el espectro en la región de la banda de 15 μm del CO_2 , se finalizará la presente sección estudiando brevemente el ensanchamiento de la banda cuando la presión superficial se duplica. Se espera, entonces, que aumente la concentración de CO_2 en la atmósfera y las alas sufran una apreciable caída de intensidad asociada a una mayor opacidad. La variabilidad del perfil $T(z)$ de Marte impide realizar el seguimiento de una misma región del planeta, ya que su espectro cambiaría tanto de una estación a otra que la anchura de la banda sería poco apreciable. En su lugar, se han tomado dos situaciones donde la temperatura superficial es similar pero la razón de la presión superficial es aproximadamente dos, atendiendo a la variación observada durante el año en distintas regiones

de la superficie de Marte.

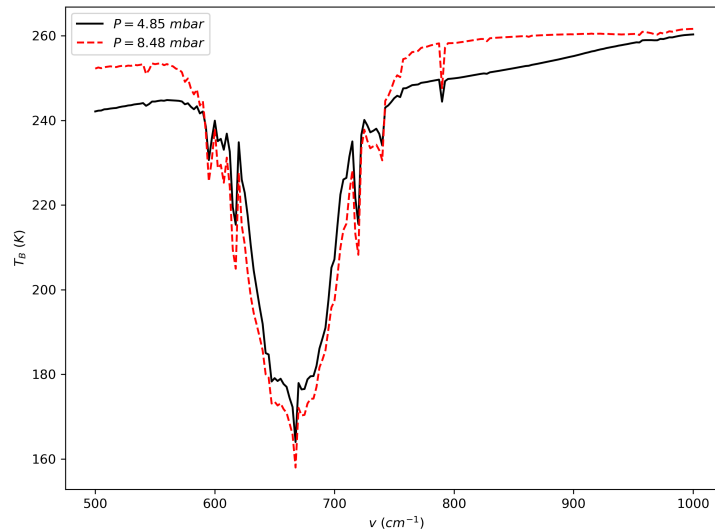


Figura 4.20: Comparación de la anchura de la banda de $15 \mu\text{m}$ del CO_2 para dos modelos de Marte que difieren principalmente en el valor de la presión en superficie: $P = 4.85 \text{ mbar}$ (en negro) y $P = 8.48 \text{ mbar}$ (en rojo)

Dejando de lado las discrepancias del continuo y de la profundidad de la banda en la Figura 4.20, que son debidas a los cristales de H_2O y a las distintas condiciones de temperatura en cada una de las regiones, respectivamente, existe un evidente ensanchamiento de la banda de $15 \mu\text{m}$ vinculado al aumento de presión atmosférica. Como se expuso en la Subsección 4.2.1, la sublimación estacional del hielo de CO_2 y H_2O en los polos puede elevar la baja presión atmosférica de Marte en cantidades nada desdeñables.

Es inmediato deducir que el ensanchamiento de la banda es señal inequívoca de una mayor presión. De los parámetros estudiados, la presión (o cantidad de CO_2) es el único que produce este ensanchamiento, así que no introduciría degeneración en los problemas anteriores. Por último, la relación S/N tampoco degenera la inferencia de la presión a menos que el orden de magnitud del ruido sea comparable a la profundidad de la banda.

4.3. Tránsito primario del exoplaneta GJ 1214b

Cuando, desde nuestra línea de visión, un exoplaneta transita por delante de su estrella, se observa un pequeño decaimiento de la luz que recibimos de dicho sistema. La magnitud de la disminución de la curva de luz en el tránsito primario, que en general es muy pequeña, es proporcional al cociente de las áreas de planeta y estrella (Sánchez López et al., 2019). Una fracción aún más pequeña de la radiación se transmite a través de la atmósfera del planeta. Como el espesor óptico u opacidad de la atmósfera depende de la longitud de onda, el radio efectivo del planeta y por tanto el decaimiento de la curva de luz es variable, de donde se extrae el espectro en transmisión del exoplaneta. Así, a una determinada longitud de onda, los niveles inferiores de una atmósfera opaca constituyen un anillo oscuro que se acopla al radio del planeta para derivar en el radio efectivo total que intercepta la luz (Ecuación 34). Equivalentemente se deduce que la espectroscopía en transmisión es una técnica sensible a los niveles superiores de las exo-atmósferas (Deeg and Belmonte, 2018). Las técnicas de observación y tratamiento de datos enfrentan constantemente el reto de superarse a sí mismas en lo que se refiere al ratio S/N, a fin de capturar señales de tránsitos con planetas cada vez más pequeños y estrellas de mayor magnitud aparente (menos brillantes desde nuestra posición). Entre tanto, por lo que se ha visto existe una amplia variedad de exoplanetas y exo-atmósferas (Deeg and Belmonte, 2018). Toda esa diversidad motiva el estudio de esta rama de la astrofísica y abre la puerta a una mayor comprensión sobre la formación y evolución de los astros y sus atmósferas, y potencialmente de la vida.

4.3.1. Introducción a GJ 1214b y su espectro en transmisión

La espectroscopía de tránsitos es capaz de proporcionar información acerca de algunas características fundamentales de las atmósferas como su composición, temperatura o la presencia de aerosoles, que también influye en la opacidad de la atmósfera. En este caso, se ha centrado la atención en los dos últimos aspectos, ciñéndonos a la composición provista por el PSG para la supertierra GJ 1214b. La Figura 4.21 presenta la distribución vertical de compuestos y el perfil de temperatura esperados para dicho exoplaneta.

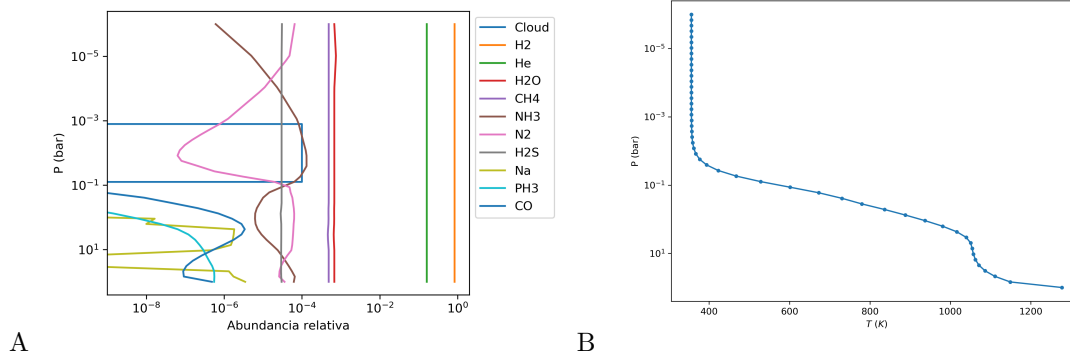


Figura 4.21: (A) Distribución vertical de los compuestos más relevantes en la atmósfera de GJ 1214b ; (B) Perfil vertical de temperatura de GJ 1214b. Fuente: Parmentier et al. (2015) vía PSG.

En la distribución vertical se ha añadido un aerosol, que consiste en una nube (‘Cloud’) cuya presencia iremos alternando para estudiar sus implicaciones en el espectro en transmisión. En primera instancia, se ha tratado de reproducir con PSG el espectro del planeta hallado en Kempton et al. (2017) entre $0.4 \mu\text{m}$ y $10 \mu\text{m}$. En este caso la nube no ha sido necesaria. La señal de tránsito se va a mostrar como el ratio del área efectiva del planeta y el área de la estrella (Sánchez López et al., 2019), que es equivalente a la cantidad de flujo estelar ocultado por el planeta. Si A_λ es el área del anillo opaco de la atmósfera, dependiente de la longitud de onda, R_p el radio del disco planetario y R_* el radio estelar, el flujo extinguido o contraste, R' , que es únicamente función del área variable del anillo, puede calcularse como

$$R'(\lambda) = \frac{A_\lambda + \pi R_p^2}{\pi R_*^2} \quad (34)$$

Para facilitar la interpretación del espectro, en la Figura 4.22 se presenta éste junto con la gráfica de transmitancias. El análisis del espectro se intrinca un poco, ya que ahora los valores inferiores no denotan bandas de absorción sino justo lo opuesto, es decir, cuanto mayor sea la opacidad de la atmósfera mayor será el área efectiva del planeta y por tanto el contraste (Ecuación 34). Por lo tanto, en este caso las cumbres del espectro representan las regiones espectrales de mayor absorptividad (menor transmitancia) y es donde aparecen las bandas de absorción características de los compuestos. Por su amplitud en el espectro, uno de los detalles espectrales más convenientes para ver la relación entre las dos gráficas de la Figura 4.22 es el entorno de $5 \mu\text{m}$, donde la atmósfera tiene una transmitancia alta y en consiguiente hay un mínimo en la radiación estelar interceptada. Además de esta, en los alrededores de $7 \mu\text{m}$ la atmósfera presenta una marcada opacidad, así que se produce un máximo local en el contraste. Por último, cabe destacar la pendiente en el azul debida a la opacidad producida por la dispersión de Rayleigh.

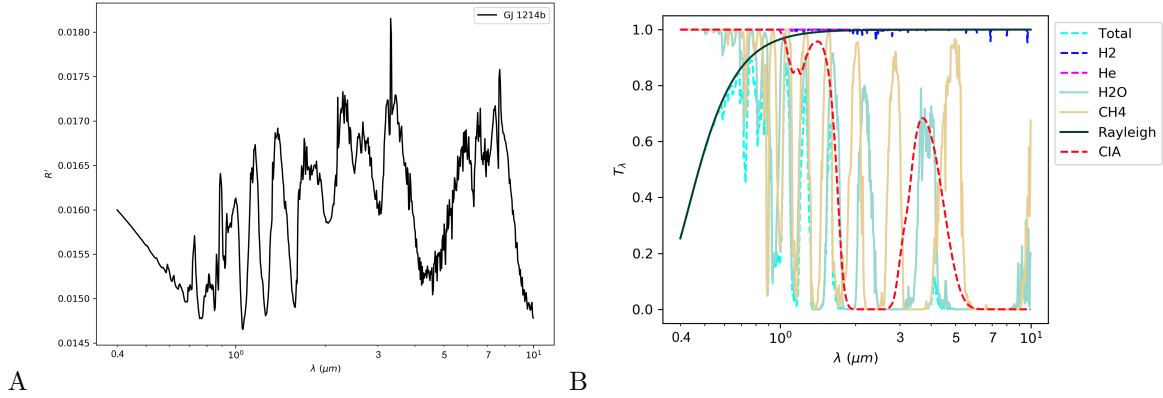


Figura 4.22: (A) Espectro del exoplaneta GJ 1214b generado en PSG. (B) Transmitancia de la atmósfera de GJ 1214b en el modelo del PSG.

4.3.2. Inferencia de la temperatura atmosférica en GJ 1214b

Para analizar potenciales resultados de espectroscopía en transmisión de aplicación real, se va a acotar el rango espectral en base a las medidas observacionales típicas de la literatura (Deeg and Belmonte, 2018). La espectroscopía del tránsito primario suele abarcar fundamentalmente el rango visible e IR cercano, donde muchas de las estrellas poseen su máximo de emisión. Allí, al margen de la dispersión de Rayleigh mencionada, los fenómenos de absorción dominan el espectro, por lo que a diferencia del espectro térmico, el espectro transmitido no será muy sensible al gradiente vertical de temperatura. En su lugar, como la escala de altura y la absorción de los compuestos dependen de T , el espectro en transmisión es sensible a la temperatura (Figura 4.23), pero sólo a su promedio en la región donde se origina el espectro en transmisión⁹ (Kempton et al., 2017). Esto implica que potencialmente deberíamos ser capaces de reproducir el espectro observado a partir de un modelo atmosférico con un perfil $T(P)$ isotermo. El problema de encontrar la temperatura que mejor ajusta este tipo de modelo al espectro observado depende de un único parámetro. Este parámetro no es explícito en el PSG, así que el *retrieval* unidimensional no se podría realizar con su herramienta sin un conocimiento ‘a priori’ del nivel efectivo. Sin embargo, como se ha visto en la Sección 4.2, el código cuenta con una función capaz de escribir este tipo de perfiles isotermos en el fichero de configuración del PSG a partir de un parámetro, así que se puede emplear el método de Nelder-Mead, cuya idoneidad para resolver problemas de minimización con un número moderado de parámetros se ha probado en la Sección 3.3.

Se parte de dos modelos de interés para la supertierra GJ 1214b: sin nube (Figura 4.22 con rango reducido) y con una nube alta (entre 0.1 bar y 1 mbar, como en la Figura 4.21 A). La Figura 4.23 recoge 4 situaciones para poder discutir el efecto que tiene sobre el espectro transmitido la presencia de una nube alta, además del efecto de la temperatura.

⁹En adelante, llamaremos nivel efectivo al nivel que está por encima de la región opaca de la atmósfera

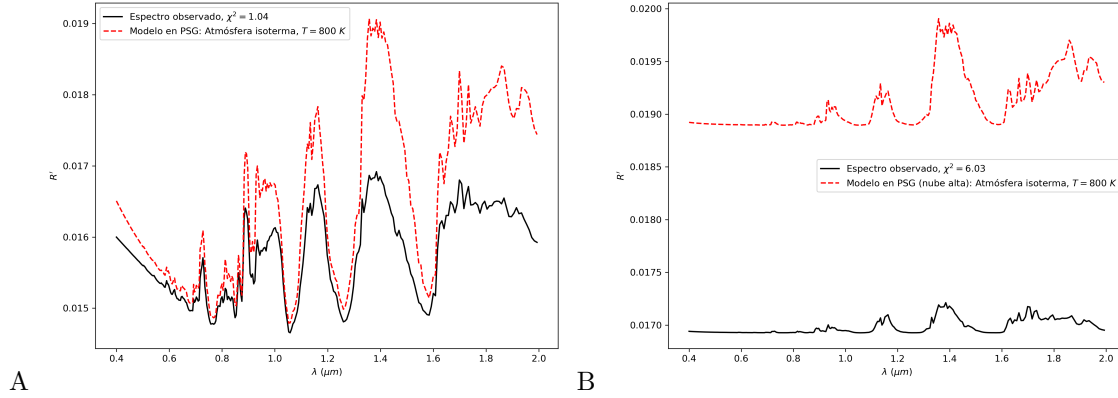


Figura 4.23: (A) Observaciones sintéticas generadas en PSG para GJ 1214b (negro) frente al espectro generado (rojo) con un modelo que considera una atmósfera isoterma a $T = 800\text{ K}$. (B) Misma comparativa introduciendo una nube alta en la modelización de la atmósfera de GJ 1214b.

Por un lado, en la Figura 4.23 se puede ver que una nube alta contribuye a aumentar la opacidad de la atmósfera en los niveles donde reside. Dado que para las nubes la dependencia de su opacidad con la longitud de onda es suave, el espectro se aplanan y se ocultan en gran medida las bandas de absorción características de los compuestos. Esto implica que la presencia de nubes y nieblas en las atmósferas de planetas extrasolares puede dificultar la detección de compuestos o la estimación de su abundancia, y que por tanto se precisa de un buen entendimiento de la física de sus aerosoles. Por otro lado, si la nube estuviera localizada en niveles muy bajos su intervención en el espectro sería nula, ya que dichos niveles concentran la mayor densidad de partículas y suelen ser de por sí opacos. En otro orden de ideas, se han simulado los espectros para una atmósfera isoterma a $T = 800\text{ K}$, temperatura cercana al valor en la superficie ficticia de $P_s = 1\text{ bar}$. En cada caso, la Figura 4.23 muestra para $T(P) = 800\text{ K}$ un aumento en la opacidad de la atmósfera, que es consecuencia de haber elegido una temperatura superior a la del nivel efectivo.

En una primera fase (que usualmente recibe el nombre de ‘*burn-in*’) se va a proceder a aproximar la temperatura isoterma de la atmósfera de GJ 1214b que mejor ajusta el espectro observado. Como se ha dicho, se resuelve con Nelder-Mead el problema inverso unidimensional para los dos modelos (Tabla 4.3). El valor de inicialización ha sido $T_0 = 800\text{ K}$.

Modelo	$T_0\text{ (K)}$	$T_f\text{ (K)}$	χ^2	n_{fev}	t	ÉXITO
sin nube	800	559	0.045	21	48 s	✓
nube alta	800	497	0.002	30	70 s	✓

Tabla 4.3: Convergencia del retrieval con Nelder-Mead para T_{atm}

En el primer modelo, la temperatura para el perfil isoterma que mejor reproduce el espectro es $T_f = 559\text{ K}$, que corresponde al nivel efectivo de aproximadamente $P_{eff,1} \approx 0.09\text{ bar}$ (Ver Figura 4.21 B). Se puede interpretar este resultado como que la atmósfera por debajo de dicho nivel es opaca a la radiación en este rango, y por tanto el espectro transmitido no es sensible a ella. Por otro lado, situando una nube entre 0.1 bar y 1 mbar , se obtiene que la temperatura isoterma de mejor ajuste sería $T_f = 497\text{ K}$, que corresponde a un nivel entorno a $P_{eff,2} \approx 0.06\text{ bar}$. Según lo comentado, era de esperar que el nivel efectivo se elevara en presencia de una nube, ya que ésta es una fuente de opacidad que está situada por encima del nivel efectivo $P_{eff,1}$. Curiosamente, el nuevo nivel efectivo no se ha elevado hasta la región superior de la nube, así que queda pendiente para los siguientes párrafos entender lo que sucede. En cambio, podría deberse a que el PSG no reajusta el perfil $T(P)$ con la inclusión de aerosoles, en cuyo caso la radiación IR atrapada por las nubes podría contribuir a un calentamiento de la atmósfera en la región colindante y $T_f = 497\text{ K}$ correspondería a niveles efectivos por encima del actual. En cualquier caso, la hipótesis de que en un espectro transmitido, y en este rango, un modelo de atmósfera isoterma a la temperatura del

nivel efectivo reproduce bastante bien las observaciones se ve reforzada por los χ^2 de la Tabla 4.3. En la Figura 4.24 se muestra la comparativa de espectros como resultado de los dos ajustes; ambas gráficas se han dibujado con unos límites del eje de ordenadas que permiten hacerse una idea de la magnitud real de las discrepancias, que si bien existen son relativamente pequeñas.

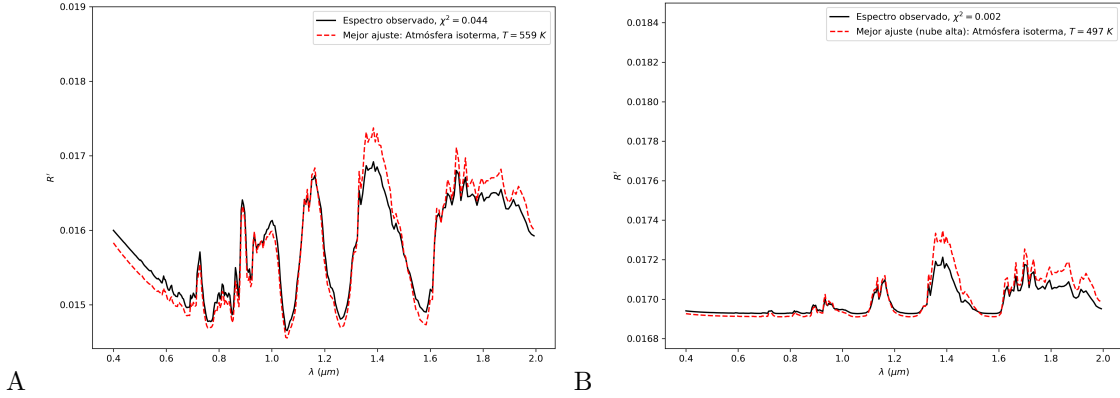


Figura 4.24: (A) Observaciones sintéticas para GJ 1214b (negro) frente al espectro generado (rojo) con un modelo que considera una atmósfera isoterma a $T = 559$ K. (B) Misma comparativa introduciendo una nube alta en la modelización de la atmósfera de GJ 1214b y cambiando en consecuencia la temperatura de la atmósfera por $T = 497$ K.

4.3.3. Perfil vertical de temperatura

Una vez se cuenta con los resultados aproximados y se ha demostrado que la hipótesis de partida es válida, resulta tentador lanzar un *retrieval* de $T(P)$ de 50 parámetros en PSG para buscar las incertidumbres y los niveles de máxima sensibilidad. En primer lugar, se muestra en la Figura 4.25 el resultado de iniciar el *retrieval* con atmósferas isotermas a $T = 800$ K.

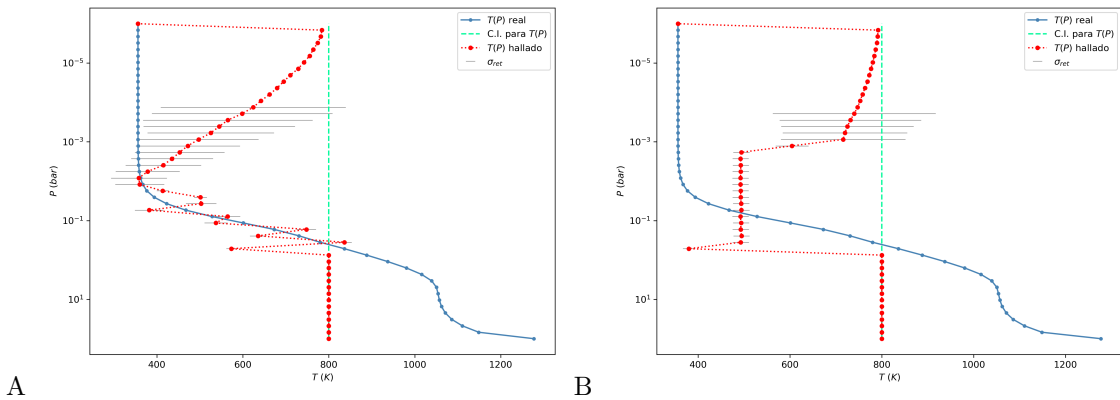


Figura 4.25: (A) Perfil de temperatura inferido para GJ 1214b (rojo) para un modelo de atmósfera sin nubes, con una inicialización de atmósfera isoterma a $T = 800$ K (en verde). (B) Lo mismo que (A) pero con un modelo atmosférico que contempla la presencia de una nube alta. En azul el perfil $T(P)$ indicado por el PSG para GJ 1214b.

La Figura 4.25 A muestra en una determinada región un bamboleo del valor de la temperatura entorno a la pendiente real del gradiente vertical de temperatura. Aunque no puede considerarse un resultado completamente exitoso, este *retrieval* demuestra que con el espectro en transmisión se tiene cierta capacidad para inferir el perfil de temperatura en una reducida región en el entorno del nivel efectivo (en este caso $P_{eff,1} \approx 0.9$ bar). El caso B (con la nube) es distinto: el perfil $T(P)$ inicial se ha movido casi en exclusiva, y a una, en la región de la nube (entre 0.1 bar y 1). La razón que justifica este resultado se va a ilustrar con el siguiente paso, que ha consistido en inicializar los

retrieval en PSG con los perfiles $T(P)$ isotermos de mejor ajuste calculados con Nelder-Mead. La Figura 4.26 muestra al mismo tiempo el resultado de ambos *retrieval* y la sensibilidad del espectro a los distintos niveles verticales.

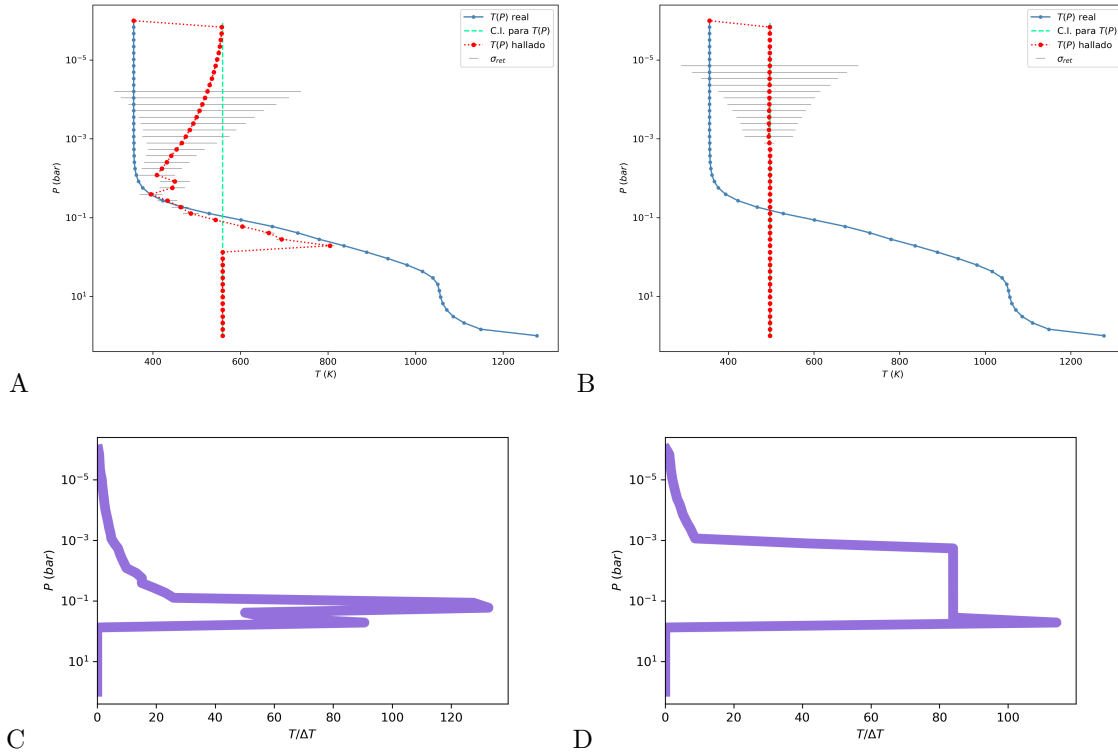


Figura 4.26: (A) Perfil de temperatura inferido para GJ 1214b (rojo) para un modelo de atmósfera sin nubes, con una inicialización de atmósfera isoterma a $T = 559$ K (en verde). (B) Lo mismo que (A) pero con un modelo atmosférico que contempla la presencia de una nube alta y temperatura de inicialización: $T = 497$ K. En azul el perfil $T(P)$ indicado por el PSG para GJ 1214b. (C) y (D) presentan la sensibilidad del espectro en transmisión a la temperatura de los diferentes niveles verticales en los modelos sin y con presencia de nubes, respectivamente.

Con un modelo libre de nubes y empleando el método de Nelder-Mead para adquirir un conocimiento previo y ubicar la solución del problema inverso, se ha logrado el mejor ajuste de este proyecto a un perfil $T(P)$, en una región vertical reducida (Figura 4.26 A). En la Figura 4.26 C se puede comprobar que, en efecto, la máxima sensibilidad del espectro se ubica en el entorno de $P_{eff,1} \approx 0.09$ bar. Además, la Figura 4.26 B muestra que, en presencia de la nube, si se inicializa el perfil vertical de temperatura en el valor $T = 497$ K, éste apenas se desplaza en el proceso de *retrieval*. Este resultado, en conjunto con el de la Figura 4.26 D, que indica que el espectro está absolutamente condicionado por la temperatura de la región que alberga la nube, conduce a pensar que el valor $T = 497$ K es la temperatura promedio de los niveles donde reside la nube. Recordemos que el nivel efectivo en este caso se había estimado en $P_{eff,2} \approx 0.06$ bar, en medio de la nube.

Se ha comprobado que la espectroscopía en transmisión es sensible únicamente a niveles superiores de la atmósfera. A partir de un espectro observado, es viable caracterizar la temperatura atmosférica absoluta del exoplaneta en cuestión, y en algunos escenarios su gradiente vertical de temperatura para algunos niveles. Sea como sea, el método de Nelder-Mead ha desempeñado un papel relevante, especialmente asistiendo la fase de ‘*burn-in*’, que trata de evaluar la ubicación aproximada de la solución del problema inverso. En el primer modelo (sin nube), haber introducido la solución obtenida por dicho método como inicialización para el *retrieval* en PSG mejora considerablemente su rumbo. El ajuste final, que ha mejorado el de la Figura 4.24 A, se muestra en la Figura 4.27, no así el del modelo que incorpora la nube, donde el método de Nelder-Mead ha bastado para afinar la temperatura de la atmósfera y el espectro en la medida de lo posible.

Aunque el *retrieval* en PSG no haya aportado un valor o espectro diferente en este segundo caso, sí se ha extraído información relevante para su análisis.

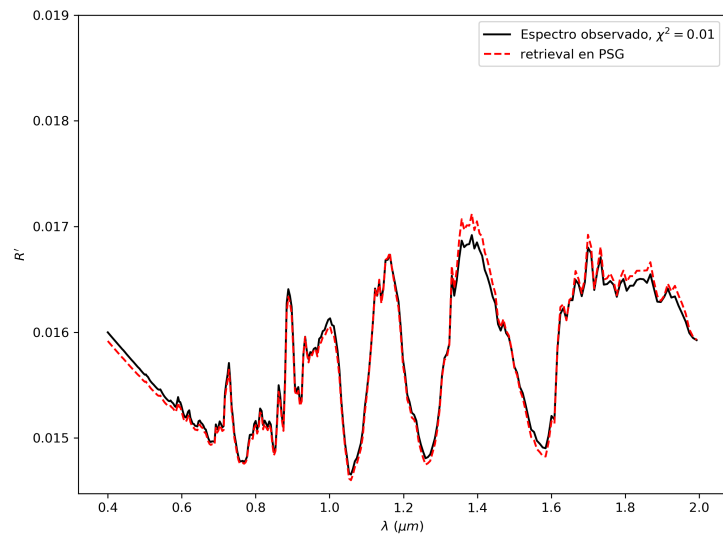


Figura 4.27: Ajuste final del espectro observado (negro) con el modelo que mejor ajusta sin considerar la nube (rojo), obtenido a partir del *retrieval* conjunto de Nelder-Mead y PSG.

5 Conclusiones

Los objetivos y distintas partes del trabajo han orientado las conclusiones en tres direcciones, como se recoge a continuación.

5.1. Implementación de la API

El código escrito en Python ha tratado de exprimir al máximo las capacidades de la herramienta PSG desde el cliente, es decir, sin la interfaz web como intermediario, tanto para la modelización del problema directo como para la resolución del problema inverso.

La inicialización de nuestro código requiere de un fichero de datos observacionales junto con una plantilla que describa la atmósfera estudiada (fichero de configuración del PSG). Con ayuda de la interfaz web de PSG se ha generado una batería de plantillas para diferentes casos realistas, de donde se elegirá una. Ésta se introduce en funciones auxiliares que incorporan un amplio abanico de posibilidades de edición, generando modelos distintos a partir de una atmósfera: algunos ejemplos son la posibilidad de introducir nubes tridimensionales o de variar el perfil vertical de temperatura.

La API de PSG se ha lanzado de 3 maneras: generación de espectros (modelo directo), transmitancias y modo *retrieval*. Como se ha indicado, el acceso a los servidores de NASA está restringido a 1000 llamadas a la API por cliente y día. Para rebasar esta barrera se ha explorado la posibilidad de lanzar la API desde el repositorio de PSG en Docker, que contiene su código por paquetes.

Para encontrar la atmósfera óptima cuyo espectro case con el observado, se han escrito funciones de Python que calculan y tienen por única salida la desviación cuadrática media de modelo y observaciones. Con la ayuda de estas funciones se puede explorar el espacio de parámetros para tratar de mejorar el conocimiento ‘a priori’. Ésta y otras capacidades como la generación de transmitancias o espectros en calidad de comparación auxilian el análisis de la solución al problema inverso.

La resolución del problema inverso se puede afrontar, en dimensiones reducidas, con el método de minimización *simplex* de Nelder-Mead, que se aplica sobre las funciones mencionadas anteriormente. Esta técnica coexiste con la herramienta de *retrieval* disponible en PSG, que se puede lanzar con tan solo añadir parámetros adicionales a los ficheros de configuración. Se ha probado que ésta funciona bien a nivel local y ha sido fructífera en la inferencia del perfil de temperatura en las atmósferas.

5.2. Aplicación a atmósferas planetarias

Uno de los objetivos principales del proyecto era desarrollar una técnica que permitiera extraer información de los parámetros de una atmósfera a partir de su espectro observado. En este proyecto, se proponen dos métodos de *retrieval*, cuyo desempeño en la resolución del problema inverso se ha discutido en la Sección 3.3. En dicha sección, se ha testado el procedimiento tomando como ejemplo la niebla de Júpiter absorbente en el azul, ya que los parámetros que la caracterizan son bien conocidos (Munguira, 2019). De esa forma, ha sido posible recuperar de forma inequívoca la densidad y tamaño de partículas de la niebla. Sin embargo, los métodos de inferencia se han topado con obstáculos en situaciones donde la solución está localizada cerca del 0, o en presencia de ‘valles’ secundarios que aparecen como resultado de la degeneración. Se ha propuesto realizar un estudio previo de cada parámetro de ajuste para intentar mejorar el conocimiento ‘a priori’, ya que una inicialización adecuada puede ser la llave para la convergencia al valor óptimo.

La utilidad de la metodología propuesta va a estar ineludiblemente condicionada por su versatilidad, así que se ha planteado y programado el problema de la forma más general posible, si bien algunos escenarios requieren de un tratamiento o funciones particulares. Para aplicar esta metodología y constatar su valía, se han elegido detenidamente otros tres problemas de interés científico en el estado del arte actual, y que son representativos de la diversidad de problemas en

el campo de atmósferas planetarias.

Inicialmente, se ha estudiado el espectro reflejado de Urano para intentar reproducir sus condiciones en latitudes bajas y polares, concretamente en lo que se refiere a la abundancia del CH_4 y su variabilidad. Con un único parámetro el método de *retrieval* de Nelder-Mead desempeña un buen papel en el ajuste, aunque para obtener la incertidumbre habría que complementarlo con la herramienta de *retrieval* de PSG. No obstante, aunque ha sido posible reproducir satisfactoriamente el espectro de Karkoschka (1998) y la variación del flujo por latitudes en una banda del metano (Sromovsky et al., 2014), para el primer resultado ha sido necesario incluir un factor 800 a la abundancia del CH_4 que el PSG contempla por defecto en la atmósfera de Urano. Se ha descartado que este valor provenga de un error en el código, de hecho, si se genera el espectro de Urano en PSG con la configuración por defecto se obtiene un espectro muy alejado de la realidad. Con este factor desorbitado, el *v.m.r.* del CH_4 en Urano resulta de 7.6%; posiblemente la discrepancia con el valor real podría explicarse por la normalización al espectro de Karkoschka.

El segundo problema tratado ha sido la inferencia del perfil vertical de temperatura en la atmósfera de Marte. Se ha considerado de interés por dos motivos: la ocasión de estudiar el espectro térmico y la alta variabilidad estacional y latitudinal del perfil $T(z)$ en Marte. La atención se ha centrado sobre la banda de $15 \mu m$ del CO_2 y sus aledaños, donde el CO_2 absorbe la radiación casi en solitario. Este caso ha dado pie a ensayar multitud de perfiles de temperatura. Hasta 100 km de altura en la atmósfera, la aproximación de gradiente constante parece ser buena para describir el perfil $T(z)$ de Marte (Figura 4.14 B). Al lanzar los *retrievals*, las mayores dificultades encontradas han sido alcanzar el mínimo de temperatura (por ejemplo, Figura 4.11), como era de esperar (Sección 2.3), y dar cuenta del aumento de temperatura en la atmósfera entre 50 y 100 kilómetros de altura (Figura 4.14 B) porque no ha habido sensibilidad a esos niveles. Es posible que ésta pueda lograrse aumentando la resolución espectral o incluso cambiando el rango espectral a una región dominada por otros compuestos candidatos a producir dicho calentamiento. En nuestros modelos, las gráficas de la sensibilidad a la temperatura de los distintos niveles de la atmósfera, indican que ésta es máxima en el entorno de 20 km. Además, el PSG ha posibilitado estudiar la misma banda durante el máximo de la tormenta global de polvo que tuvo lugar en 2018 y el ensanchamiento de la banda que se induce a consecuencia del ciclo de volátiles en Marte. Durante la tormenta de polvo se ocultó la superficie y se elevó el nivel efectivo de emisión a la atmósfera, así que la sensibilidad máxima del modelo a la temperatura se desplaza a una región inferior de la atmósfera, 10 km, que además de ser responsable de las emisiones da cobijo al polvo (Figura 4.19). Se ha visto que los aerosoles modifican el equilibrio térmico de los distintos niveles atmosféricos, y que podrían ser indetectables en situaciones donde el S/N es crítico. Finalmente, el ensanchamiento por la presión no degenera el problema anterior, y, a menos que la magnitud del ruido sea comparable a la profundidad de la banda, la inferencia de la presión tampoco se ve comprometida por el S/N.

En el último problema se ha abordado la inferencia de la temperatura atmosférica de un planeta extrasolar a partir de su espectro en transmisión. Este problema inverso se ha resuelto para una atmósfera superior libre de nubes y en presencia de una nube. Se ha argumentado que el espectro en transmisión no es sensible a todo el perfil de temperatura de la atmósfera, sino que para reproducirlo basta con conocer la temperatura de un nivel efectivo. Al hilo de esto, se ha lanzado un *retrieval* con Nelder-Mead para obtener el mejor ajuste del espectro (Figura 4.24) considerando una atmósfera isoterma y variando únicamente su temperatura. La opacidad adicional que introduce una nube, además de aplanar el espectro también eleva el nivel efectivo de la atmósfera, o lo que es lo mismo, oculta a nuestra vista más niveles atmosféricos. Al lanzar *retrievals* del perfil vertical completo capa a capa, en presencia de una nube se adopta la temperatura de la región donde ésta reside. Con una atmósfera superior libre de nubes se ha obtenido de forma muy satisfactoria la temperatura de una región restringida de la atmósfera (Figura 4.26 A). Para ello ha sido rentable combinar los métodos de Nelder-Mead y PSG. La Figura 4.27 muestra el ajuste final del espectro observado para un exoplaneta libre de nubes con el del modelo que se ha logrado con la inferencia progresiva de la temperatura. El PSG y nuestra interfaz han sido capaces de obtener, en conjunto, un resultado similar a los que podrían dar mucho que hablar en los próximos años. De hecho, un aspecto crucial del PSG es su orientación al estudio de exoplanetas, lo que le exige un extra de versatilidad a la herramienta y le augura un futuro prometedor.

5.3. Ampliación y mejoras propuestas

Para concluir, se van a hacer unas últimas reflexiones acerca de las hipotéticas proyecciones futuras que podrían contribuir a seguir desarrollando el código aquí presentado:

- Dado que el RT es un modelo de diagnóstico, el PSG no recalcula internamente el perfil vertical de temperatura con la introducción de aerosoles. En consecuencia, no se ha podido simular adecuadamente el espectro térmico de Marte para diferentes abundancias de polvo que no estén en la base de datos junto al perfil $T(z)$ del momento, lo que podría tener cierto interés teórico. Sin embargo, como se sabe la forma de introducir un perfil vertical de temperatura en los modelos de PSG, sería interesante implementar en nuestro código un modelo climático GCM capaz de pronosticar el perfil $T(z)$ a partir de la distribución vertical de aerosoles.
- Con respecto al código escrito en Python, el espacio de parámetros podría explorarse utilizando algoritmos MCMC (Markov Chain Monte Carlo) que orientan mejor la búsqueda del mínimo de χ^2 (MacKay, 2003), en lugar de emplear el método de fuerza bruta que es ineficiente para problemas de más de dos dimensiones. No obstante, los métodos de Monte Carlo requieren generar más muestras que llamadas permite al día la API del PSG, así que al mismo tiempo sería necesario implementar el código de transporte radiativo por cuenta propia.
- Otra opción sería aplicar métodos MCMC con llamadas a la API a través de Docker, ya que en ese caso no habría límite de llamadas. La potencia de los servidores del GCP favorecería un buen rendimiento de la API con Docker, mientras que el espacio de almacenamiento necesario para albergar las bases de datos espectroscópicas y todos los paquetes de código del PSG sería de unos 146 GB.
- Queda pendiente explorar la posible inclusión de otros algoritmos de minimización estándar en el código, ya que algunos presentan opciones de derivación para una ‘convergencia inteligente’.
- Por último, la estructura en bloques de nuestro programa bien podría dar lugar, con trabajo, a un paquete autoconsistente de herramientas capaz de afrontar cualquier problema físico accesible para el PSG. Si se cuida la robustez de este ejecutable frente a todo tipo de errores, podría incluso hacerse público.

Bibliografía

- Banfield, D., Gierasch, P., Bell, M., Ustinov, E., Ingersoll, A., Vasavada, A., West, R. A., and Belton, M. (1998). Jupiter's cloud structure from galileo imaging data. *Icarus*, 135(1):230–250.
- Bevington, P. R. and Robinson, D. K. (2003). *Data reduction and error analysis for the physical sciences; 3rd ed.* McGraw-Hill, New York, NY.
- Deeg, H. J. and Belmonte, J. A. (2018). *Handbook of Exoplanets.* Springer.
- Edwards, D. (1992). Genln2: A general line-by-line atmospheric transmittance and radiance model. version 3.0: Description and users guide. *ggl*.
- Guzewich, S. D., Lemmon, M., Smith, C., Martínez, G., de Vicente-Retortillo, Á., Newman, C., Baker, M., Campbell, C., Cooper, B., Gómez-Elvira, J., et al. (2019). Mars science laboratory observations of the 2018/mars year 34 global dust storm. *Geophysical Research Letters*, 46(1):71–79.
- Hanel, R., Conrath, B., Hovis, W., Kunde, V., Lowman, P., Pearl, J., Prabhakara, C., Schlachman, B., and Levin, G. (1972). Infrared spectroscopy experiment on the mariner 9 mission: Preliminary results. *Science*, 175(4019):305–308.
- Hanel, R. A., Conrath, B., Jennings, D., and Samuelson, R. (2003). *Exploration of the solar system by infrared remote sensing.* Cambridge University Press.
- Hansen, J. E. and Travis, L. D. (1974). Light scattering in planetary atmospheres. *Space science reviews*, 16(4):527–610.
- Irwin, P. (2009). *Giant planets of our solar system: atmospheres, composition, and structure.* Springer Science & Business Media.
- Jakosky, B. M., Haberle, R. M., and Arvidson, R. E. (2005). The changing picture of volatiles and climate on mars. *Science*, 310(5753):1439–1440.
- James, D. (2001). Mars facts. <https://web.archive.org/web/20130607140708/http://quest.nasa.gov/aero/planetary/mars.html>. Accessed: 2020-08-25.
- Karkoschka, E. (1998). Methane, ammonia, and temperature measurements of the jovian planets and titan from ccd-spectrophotometry. *Icarus*, 133(1):134–146.
- Kempton, E. M.-R., Lupu, R., Owusu-Asare, A., Slough, P., and Cale, B. (2017). Exo-transmit: An open-source code for calculating transmission spectra for exoplanet atmospheres of varied composition. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 129(974):044402.
- Liou, K.-N. (2002). *An introduction to atmospheric radiation.* Elsevier.
- MacKay, D. J. (2003). *Information theory, inference and learning algorithms.* Cambridge university press.
- Marley, M. S., Ackerman, A. S., Cuzzi, J. N., and Kitzmann, D. (2013). Clouds and hazes in exoplanet atmospheres. *Comparative Climatology of Terrestrial Planets*, 1:367–391.
- Mersmann, K. (2015). The fact and fiction of martian dust storms. <https://www.nasa.gov/feature/goddard/the-fact-and-fiction-of-martian-dust-storms>. Accessed: 2020-07-29.
- Munguira, A. (2019). Espectroscopía visible e infrarroja de júpiter.
- Nelder, J. A. and Mead, R. (1965). A simplex method for function minimization. *The computer journal*, 7(4):308–313.
- North, G. R., Pyle, J. A., and Zhang, F. (2014). *Encyclopedia of atmospheric sciences*, volume 1. Elsevier.
- ODell, C. (2014). An introduction to optimal estimation theory. https://reef.atmos.colostate.edu/~odell/at721/lectures/optimal_estimation.pdf. Accessed: 2020-09-09.

- Parmentier, V., Showman, A. P., and de Wit, J. (2015). Unveiling the atmospheres of giant exoplanets with an echo-class mission. *Experimental Astronomy*, 40(2-3):481–500.
- Prabhakara, C. and Hogan Jr, J. S. (1965). Ozone and carbon dioxide heating in the martian atmosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 22(2):97–109.
- Ramirez, S., Coll, P., Da Silva, A., Navarro-Gonzalez, R., Lafait, J., and Raulin, F. (2002). Complex refractive index of titan’s aerosol analogues in the 200–900 nm domain. *Icarus*, 156(2):515–529.
- Rodgers, C. D. (2000). *Inverse methods for atmospheric sounding: theory and practice*, volume 2. World scientific.
- Sanchez-Lavega, A. (2011). *An introduction to planetary atmospheres*. CRC Press.
- Sánchez-Lavega, A., del Río-Gaztelurrutia, T., Hernández-Bernal, J., and Delcroix, M. (2019). The onset and growth of the 2018 martian global dust storm. *Geophysical Research Letters*, 46(11):6101–6108.
- Sánchez López, A. et al. (2019). Characterization of exo-atmospheres with transmission spectroscopy.
- Sromovsky, L., Karkoschka, E., Fry, P., Hammel, H., de Pater, I., and Rages, K. (2014). Methane depletion in both polar regions of uranus inferred from hst/stis and keck/nirc2 observations. *Icarus*, 238:137–155.
- Tarantola, A. (2005). *Inverse problem theory and methods for model parameter estimation*. SIAM.
- Villanueva, G., Mumma, M., Novak, R., Käufl, H., Hartogh, P., Encrenaz, T., Tokunaga, A., Khayat, A., and Smith, M. (2015). Strong water isotopic anomalies in the martian atmosphere: Probing current and ancient reservoirs. *Science*, 348(6231):218–221.
- Villanueva, G. L., Smith, M. D., Protopapa, S., Faggi, S., and Mandell, A. M. (2018). Planetary spectrum generator: An accurate online radiative transfer suite for atmospheres, comets, small bodies and exoplanets. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 217:86–104.
- West, R. A., Baines, K. H., Friedson, A. J., Banfield, D., Regent, B., and Taylor, F. W. (2004). Jovian clouds and haze. *Jupiter: The planet, satellites and magnetosphere*, 1:79–104.
- Williams, D. R. (2020). Mars fact sheet. <https://nssdc.gsfc.nasa.gov/planetary/factsheet/marsfact.html>. Accessed: 2020-07-29.

A Función de edición para generar una niebla en 3D

```
import subprocess
import re
import tempfile

def niebla_3D(param,*args):
    # param: vector a priori de tres dimensiones para Nelder-Mead
    # args: espectro observado (misma resolución que el modelo empleado)
    """
    La función permitirá cambiar la densidad, el tamaño de partículas
    y la altura de la niebla en la atmósfera de Júpiter. Después, llamará
    al PSG para obtener un espectro que finalmente comparará con el observado.
    """
    # =====DEFINICIÓN DE VARIABLES=====
    #flux1: flujo observado (entra como tupla a Nelder-Mead)
    if len(args)>0:
        flux1=list(args)
    #flux2: flujo en el modelo generado para PSG
    #Parámetro de escala de la niebla:
    scaler=float(param[0])
    #Tamaño de partículas:
    particle_size=float(param[1])
    #Altura de la base de la niebla:
    P_base=float(param[2])
    #Evitar los valores negativos
    if param[0]<0:
        param[0]=42 #Esta asignación acelera la contracción para $$
    if param[1]<0:
        param[1]=abs(param[1])
    if param[2]<0:
        param[2]=abs(param[2])
    # =====
    #Fichero inicial de configuración para Júpiter:
    config_file="Config/Jupiter_Ndim.txt"
    y1=open(config_file, "r")
    b=y1.readlines()
    global config_file2 #Para poder trabajar externamente con el nuevo modelo
    config_file2="Config/transition_config.txt"
    y2=open(config_file2,"w")
    # =====EDICIÓN DEL FICHERO DE PSG=====
    #Líneas que hay que cambiar:
    pattern=r"<ATMOSPHERE-LAYER-" #Hay 50 niveles verticales enumerados
    pattern1=">"
    #Cambiar el valor de 'Haze' (cuarto elemento de la distribución vertical,
    # primero se dan la Presión y Temperatura):
    elemento=3
    pattern2=r"<ATMOSPHERE-ASIZE>"
    aerosol=2 # 'Haze' es el tercer término en la lista de aerosoles
    N_haze=[]
    for i in range(len(b)):
        #Buscar los patrones en cada línea del fichero de configuración:
        match=re.search(pattern,b[i])
        match1=re.search(pattern1, b[i])
        match2=re.search(pattern2, b[i])
        if match != None: #El patrón buscado está en una línea del fichero
            sp=b[i][match1.start()+1:].split(",") #Se hace una lista de todos
            # los valores que están detrás de pattern1 separados por comas
            sp[elemento]=str(float(sp[elemento])*scaler) #el elemento
            # correspondiente a Haze se multiplica por el parámetro de escala
            N_haze.append(float(sp[elemento])*scaler)
            #Se reemplaza la antigua lista de valores por la nueva:
```

```

        b[i]=b[i].replace(b[i][match1.start()+1:-1], ",".join(sp))
    if match2 != None: #(idem)
        sp=b[i][match2.start()+1:].split(",")
        sp[aerosol]=str(particle_size)
        b[i]=b[i].replace(b[i][match2.start()+1:-1], ",".join(sp))

#Se define la parte alta de la capa con una constante elegida: 0.5
P_top=0.5*P_base
#Nube rectangular, se define la densidad con ayuda de la lectura anterior:
Nmax=max(N_haze)
for i in range(len(b)): #(idem)
    match=re.search(pattern,b[i])
    match1=re.search(pattern1, b[i])
    if match != None:
        sp=b[i][match1.start()+1:].split(",")
        P=float(sp[0]) #En el fichero de configuración la presión
        # corresponde al primer valor en cada nivel atmosférico
        if P<P_top: #Densidad 0 por encima de la parte alta de la nube
            sp[elemento]=str(0)
        elif P_base>=P>=P_top: #Densidad Nmax en los niveles de la nube
            sp[elemento]=str(float(Nmax))
        elif P>P_base: #Densidad 0 por debajo de la parte baja de la nube
            sp[elemento]=str(0)
        b[i]=b[i].replace(b[i][match1.start()+1:-1], ",".join(sp))
#Escribir las líneas modificadas en el nuevo fichero de configuración:
y2.writelines(b)
y2.truncate()
y2.close()
y1.close()

# =====
# =====LLAMADA AL MODELO DIRECTO DE PSG=====
with tempfile.TemporaryFile(mode='w+') as f:
    CurlUrl2='curl --data-urlencode file@' + config_file2 + \
    +' https://psg.gsfc.nasa.gov/api.php ' #NO QUITAR ESPACIOS
    a=subprocess.run(CurlUrl2, capture_output=True, shell=True, text=True)
    f.write(a.stdout) #Escribir la salida: longitud de onda, flujo
    f.seek(0)
    global flux2 #Para graficar espectros externamente
    flux2=[] #Unidades de radiancia espectral (W/sr/m^2/um)
    for line in f.readlines():
        if line[0]!='#': #Si el primer elemento de la línea no es un '#'
            # (comentario), entonces se leen los valores por columnas
            a=line.split()
            flux2.append(float(a[1])) #Segunda columna: Espectro generado

# =====
# =====AJUSTE DE MODELO Y OBSERVACIONES=====
N=len(flux2) # Número de puntos
cor=0
for j in range(N):
    #Calcular desviación cuadrática media o chi^2:
    cor+=((flux1[j]-flux2[j])**2)/(0.05*flux1[j])**2
    #Desviación estándar: sigma=0.05*flux1[j]
    #Grados de libertad: eta=N-1
cor=cor/(N-1)
print("param=", param, "cor=", cor) #Línea para el seguimiento del proceso
return cor #Salida: sólo chi^2 para minimizar la función con respecto a él

# =====

```

Figura A.1: Ejemplo de edición de una plantilla de PSG y de cálculo de χ^2 dentro de la misma función.