

ANÁLISIS DE LA MEZCLA DE MASAS DE AGUA EN LA CAMPAÑA TRANSMOW MEDIANTE OMPA Y MONTE CARLO

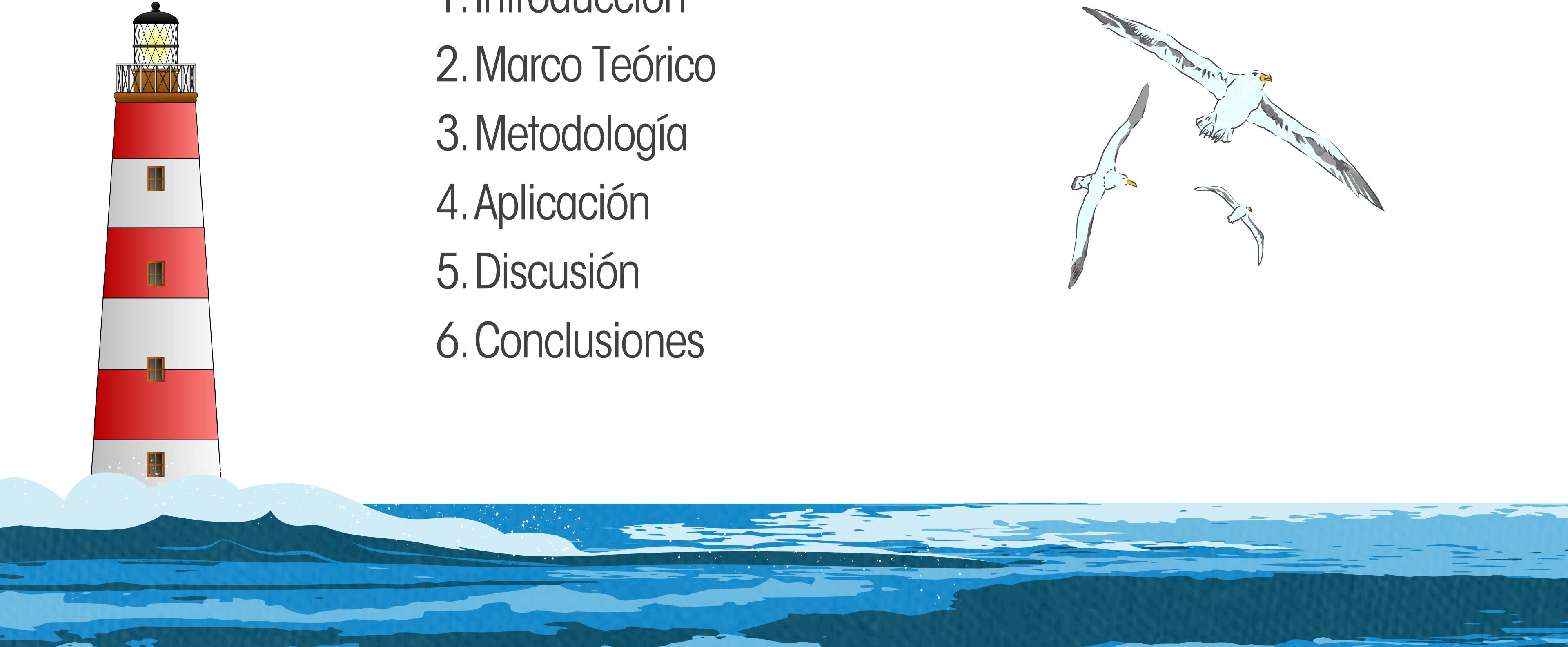
Trabajo de Fin de Grado

Tutor: Leopoldo Pena González
Por: Aitana Tomás San Martín



Índice:

1. Introducción
2. Marco Teórico
3. Metodología
4. Aplicación
5. Discusión
6. Conclusiones



Contexto: El océano

Alteración de su equilibrio:

AMOC
Debilitada

IPCC
Punto de inflexión climático

Para **analizar** cómo interactúa

Necesitamos **herramientas cuantitativas avanzadas**

→ **Análisis Multiparamétrico Óptimo (OMPA)** → Modeliza procesos de mezcla

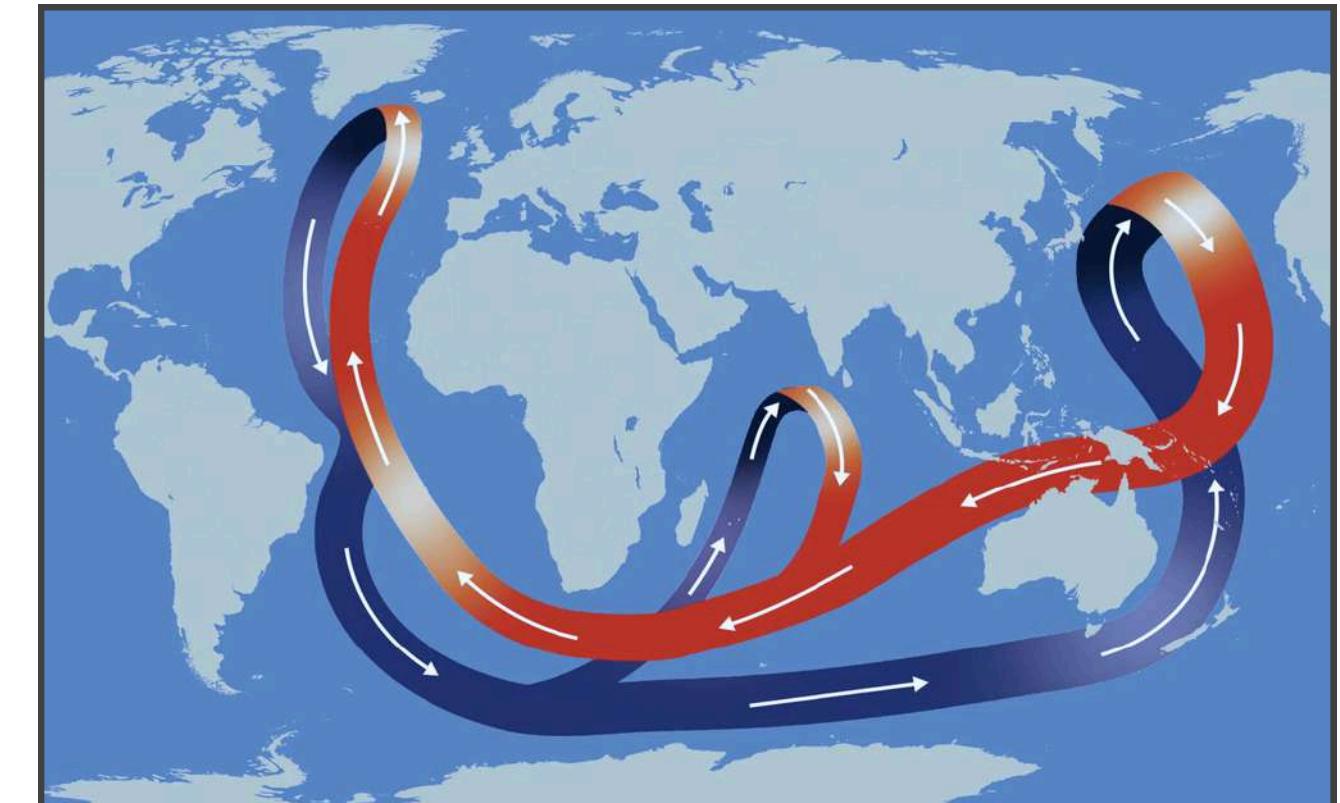
Motivación: **Limitaciones**

Abordar

Papel crucial en el **sistema climático global**.

Comprender **cómo** funcionan es esencial

Moderador térmico
Sumidero de carbono



→ Subjetividad al escoger parámetros de entrada



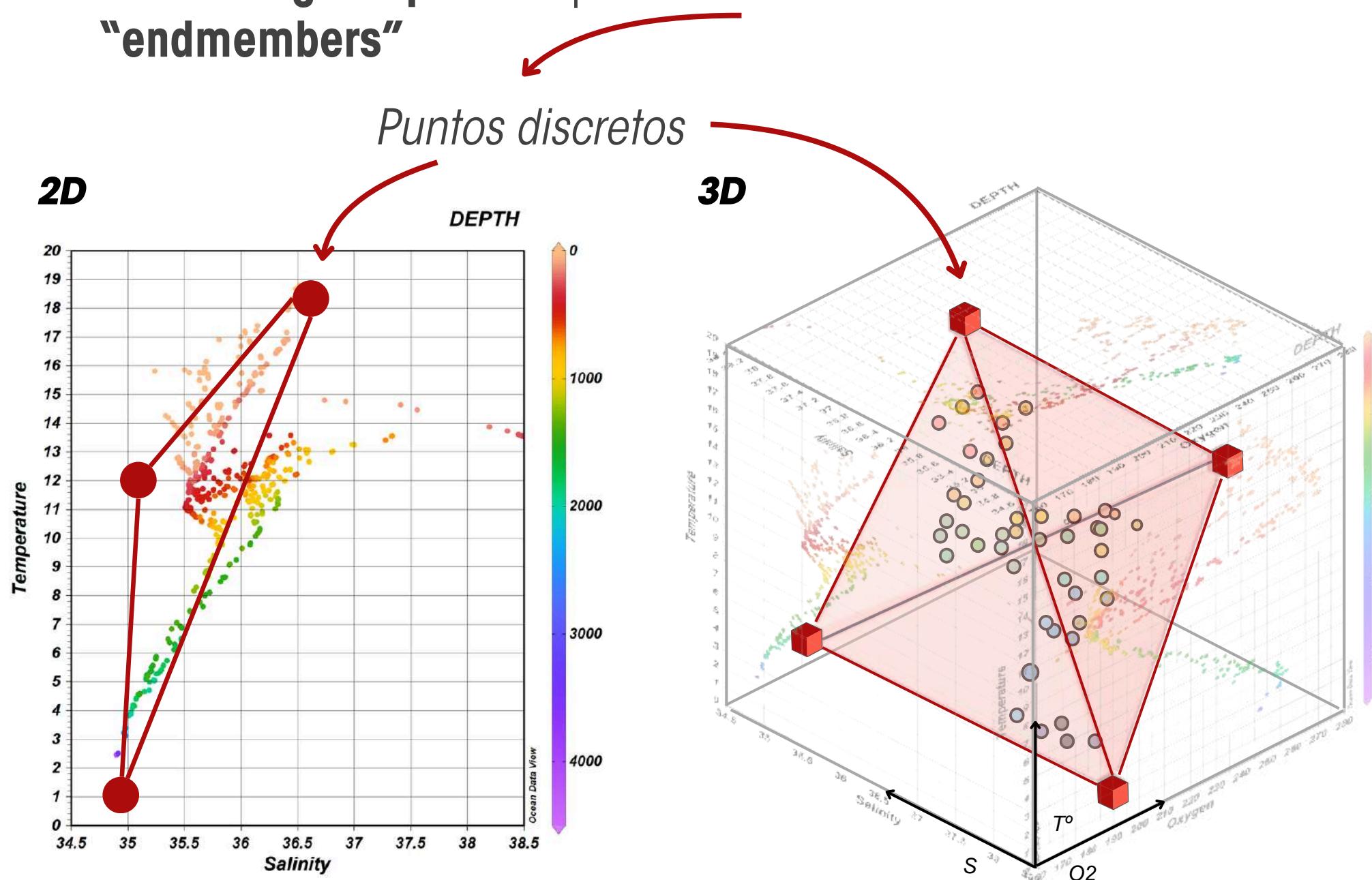
Objetivos

- Desarrollar una **herramienta computacional** (en lenguaje **Python**) que integre el Análisis Multiparamétrico Óptimo (**OMPA**) clásico con **simulaciones de Monte Carlo** de los **endmembers** de las diferentes **masas de agua** estudiadas.
- **Aplicación** de esta nueva herramienta computacional en un **caso de estudio real**. En concreto los **datos hidrográficos** recogidos durante la campaña oceanográfica **TRANSMOW (2021)**.



Definiciones

- **Masa de agua:** Volúmenes características uniformes
- “**Masas de agua tipo**”: Representación idealizada de una masa de agua “**endmembers**”



MASA DE AGUA



MASAS DE AGUA TIPO

MOW NADW NACW

ENDMEMBERS

T1	T2	T3
S1	S2	S3
O1	O2	O3

OMPA clásico

Estimar la **proporción** de distintos tipos de agua (**endmembers**) en una muestra oceánica

Principios:

Cualquier muestra

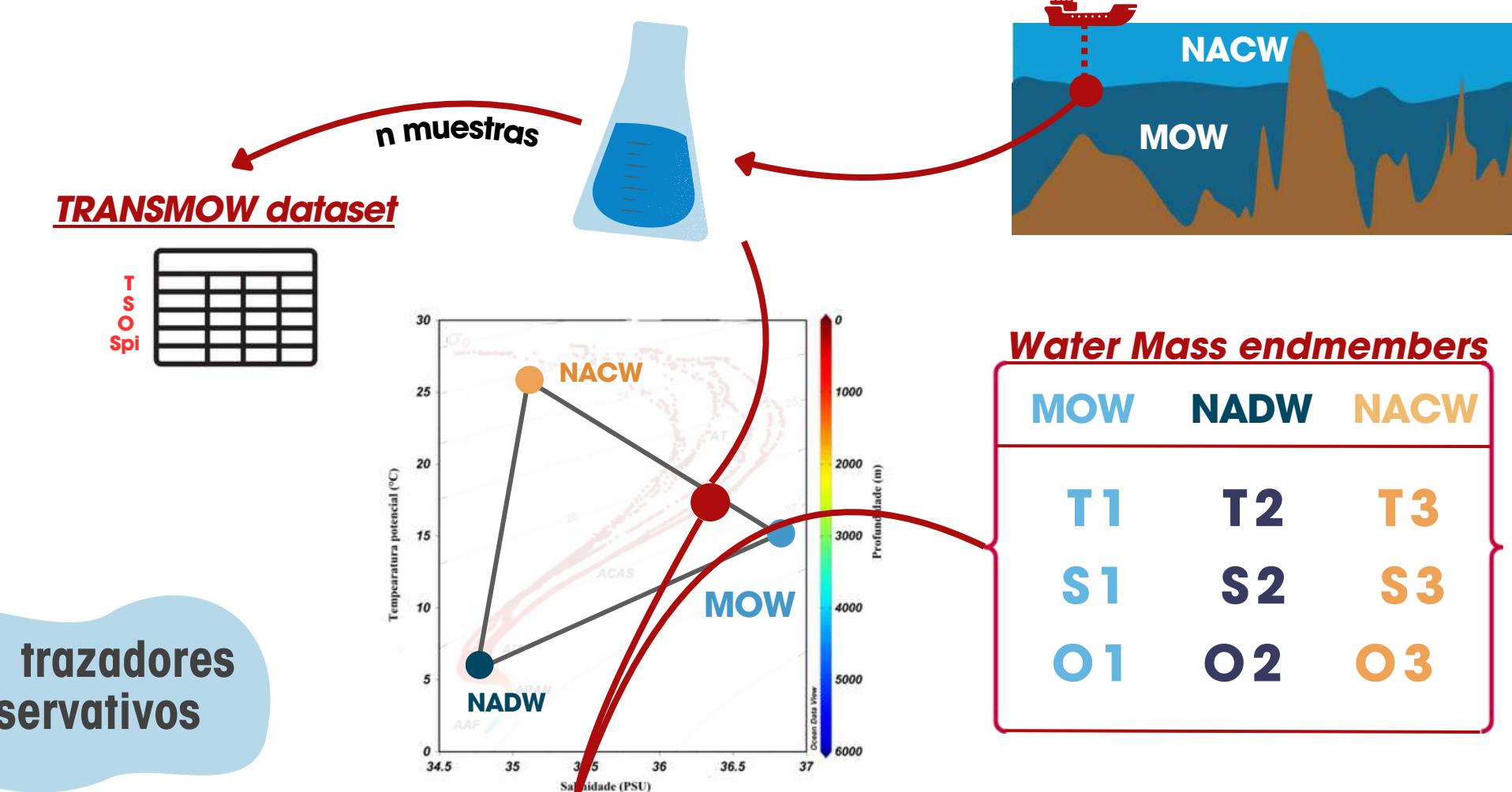
Combinación lineal

M endmembers

Propiedades
físico-químicas

A partir de:

M – 1 trazadores conservativos

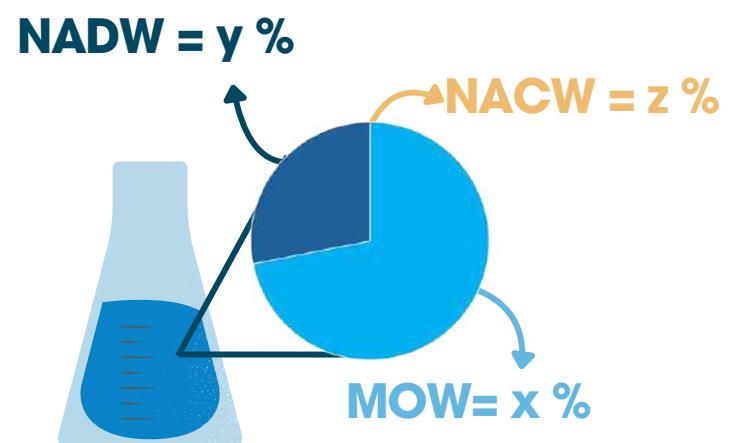


Restricciones del modelo:

No pueden ser **negativas**
(físicamente inválido).

Las fracciones deben **sumar 1**

$$\left. \begin{array}{l} xT_1 + yT_2 + zT_3 = T \\ xS_1 + yS_2 + zS_3 = S \\ xO_1 + yO_2 + zO_3 = O \\ x + y + z = 1 + \epsilon f \\ (x, y, z) > 0 \end{array} \right\} =$$



Representación conceptual del OMPA:

Problema del OMPA clásico:

Masas de agua

No homogéneas ni constantes

Variabilidad natural

Debido a:



Selección Endmembers

Sesgo

Subestimación incertidumbre resultados

- Aportes de agua dulce
- Cambios en las tasas de evaporación
- Calentamiento superficial

	Θ (°C)	S ($\mu\text{mol kg}^{-1}$)	O_2^0
ENACW ₁₆	16.0 ± 0.6	36.20 ± 0.06	246 ± 7
ENACW ₁₂	12.3 ± 0.6	35.66 ± 0.06	251 ± 8
SPMW ₈	8.0 ± 0.6	35.23 ± 0.06	289 ± 9
SPMW ₇	7.1 ± 0.6	35.16 ± 0.06	280 ± 8
IrSPMW	5.0 ± 0.6	35.01 ± 0.06	310 ± 9
LSW	3.40 ± 0.4	34.86 ± 0.01	307 ± 9
SAIW ₆	6.0 ± 0.5	34.70 ± 0.03	297 ± 9
SAIW ₄	4.5 ± 0.5	34.80 ± 0.03	290 ± 9
MW	11.7 ± 0.2	36.50 ± 0.07	190 ± 6
ISOW	2.7 ± 0.1	35.00 ± 0.02	294 ± 9
DSOW	1.30 ± 0.2	34.905 ± 0.01	314 ± 9
PIW	0.0 ± 0.2	34.65 ± 0.03	320 ± 10
NEADW _U	2.5 ± 0.5	34.940 ± 0.07	274 ± 8
NEADW _L	1.98 ± 0.03	34.895 ± 0.003	252 ± 8
R^2	0.9999	0.9984	0.9939
SDR	0.009	0.005	2
SDR / ε	2	2	2

Por lo tanto:

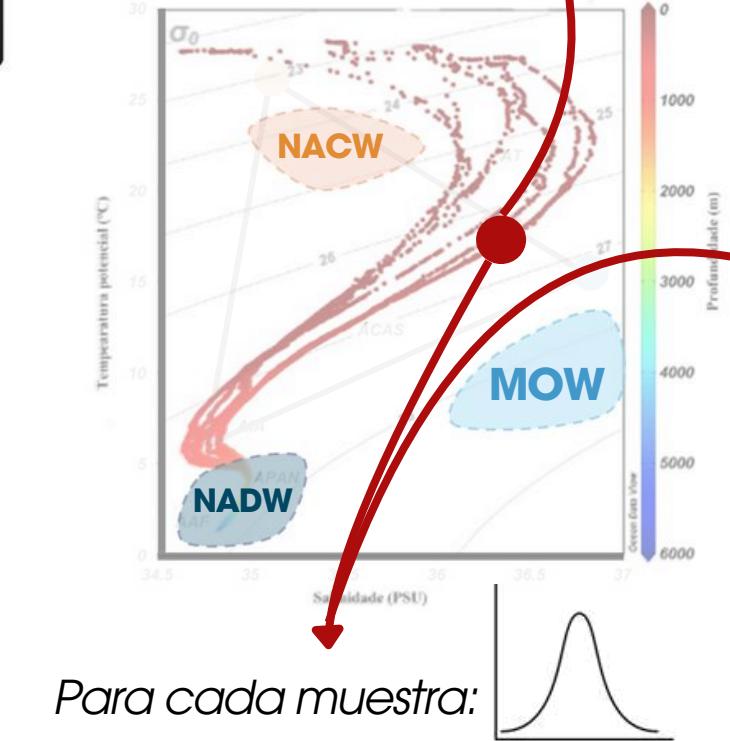
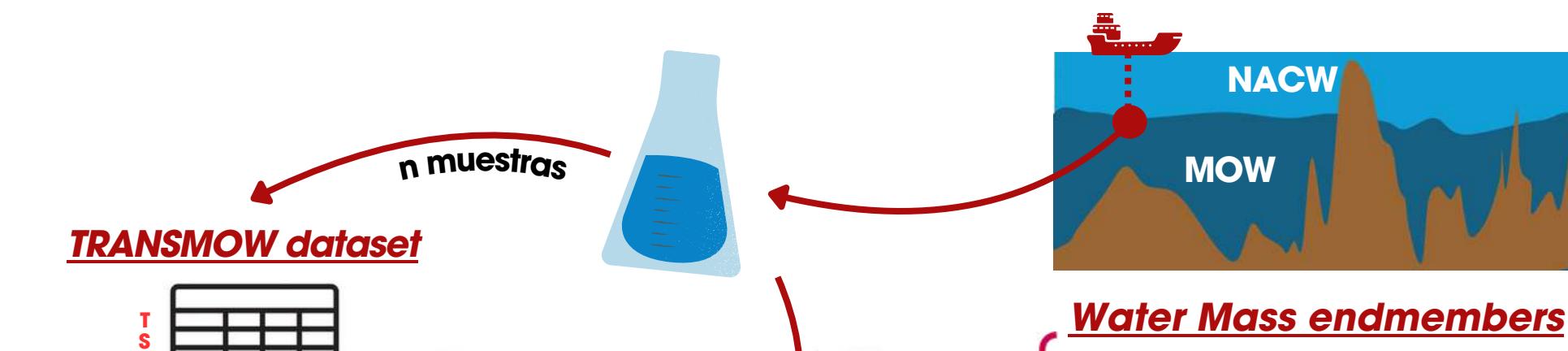
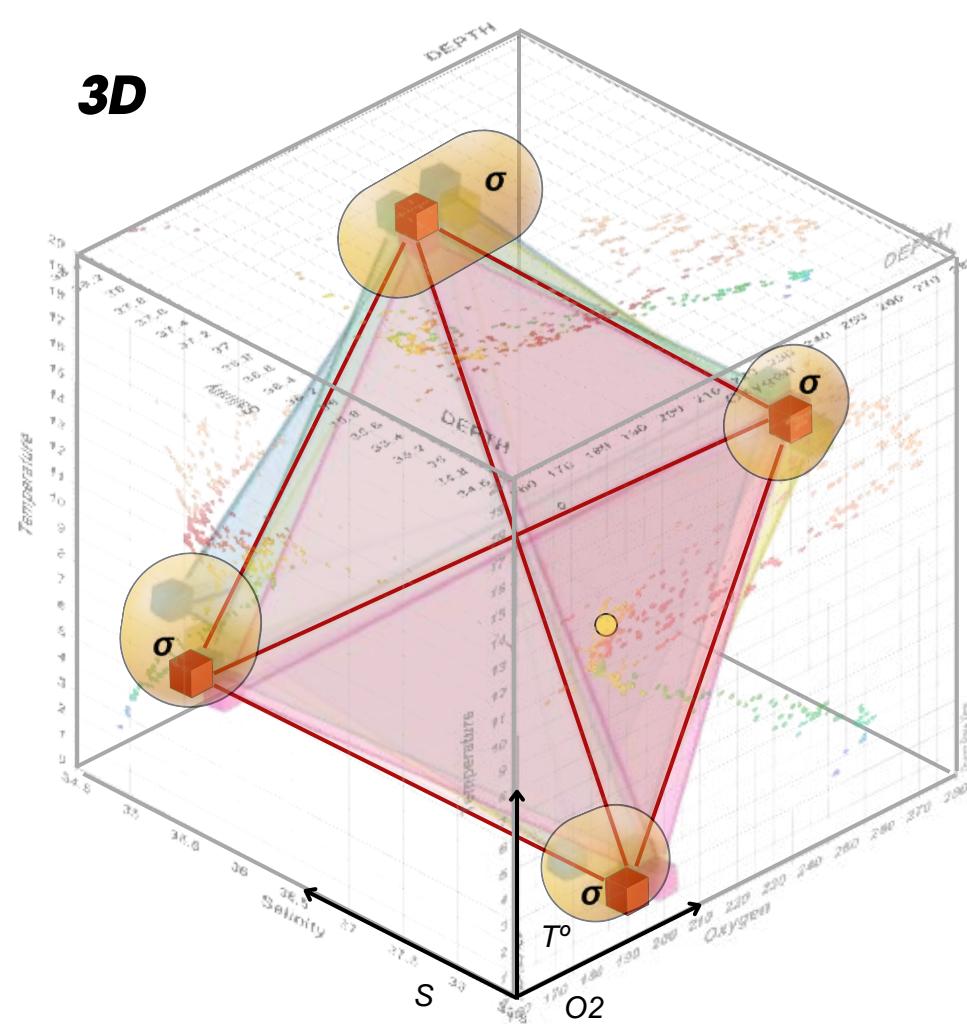
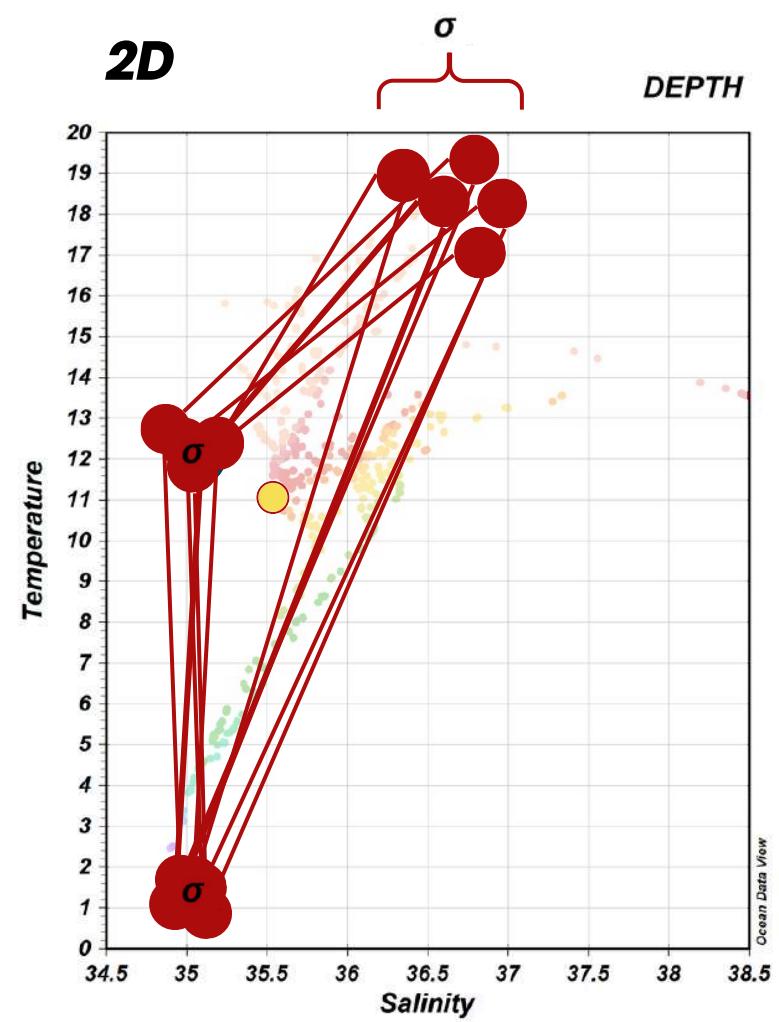
ENDMEMBER

Debe caracterizarse mediante un **rango de valores** que refleje su **variabilidad natural**

OMPA + Monte Carlo

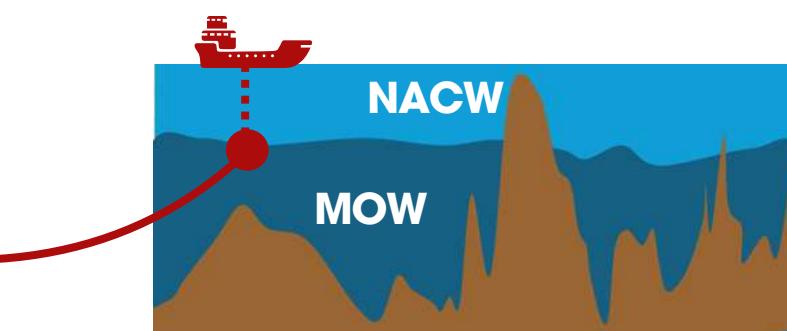
El método de Monte Carlo

- Genera **valores aleatorios** dentro de rangos definidos.
- Proporciona distribuciones probabilísticas en lugar de valores fijos.



OMPA

$$\begin{aligned} xT_1 + yT_2 + zT_3 &= T \\ xS_1 + yS_2 + zS_3 &= S \\ xO_1 + yO_2 + zO_3 &= O \\ x + y + z &= 1 + \varepsilon_f \\ (x, y, z) &> 0 \end{aligned}$$

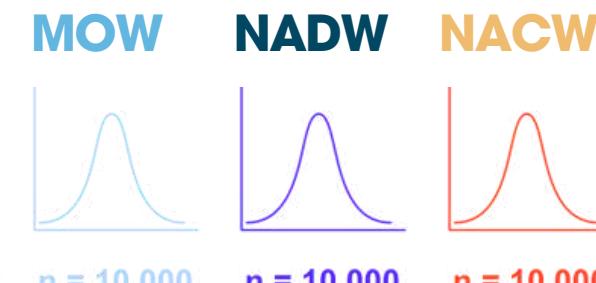


Water Mass endmembers



Para cada parámetro:

Monte Carlo



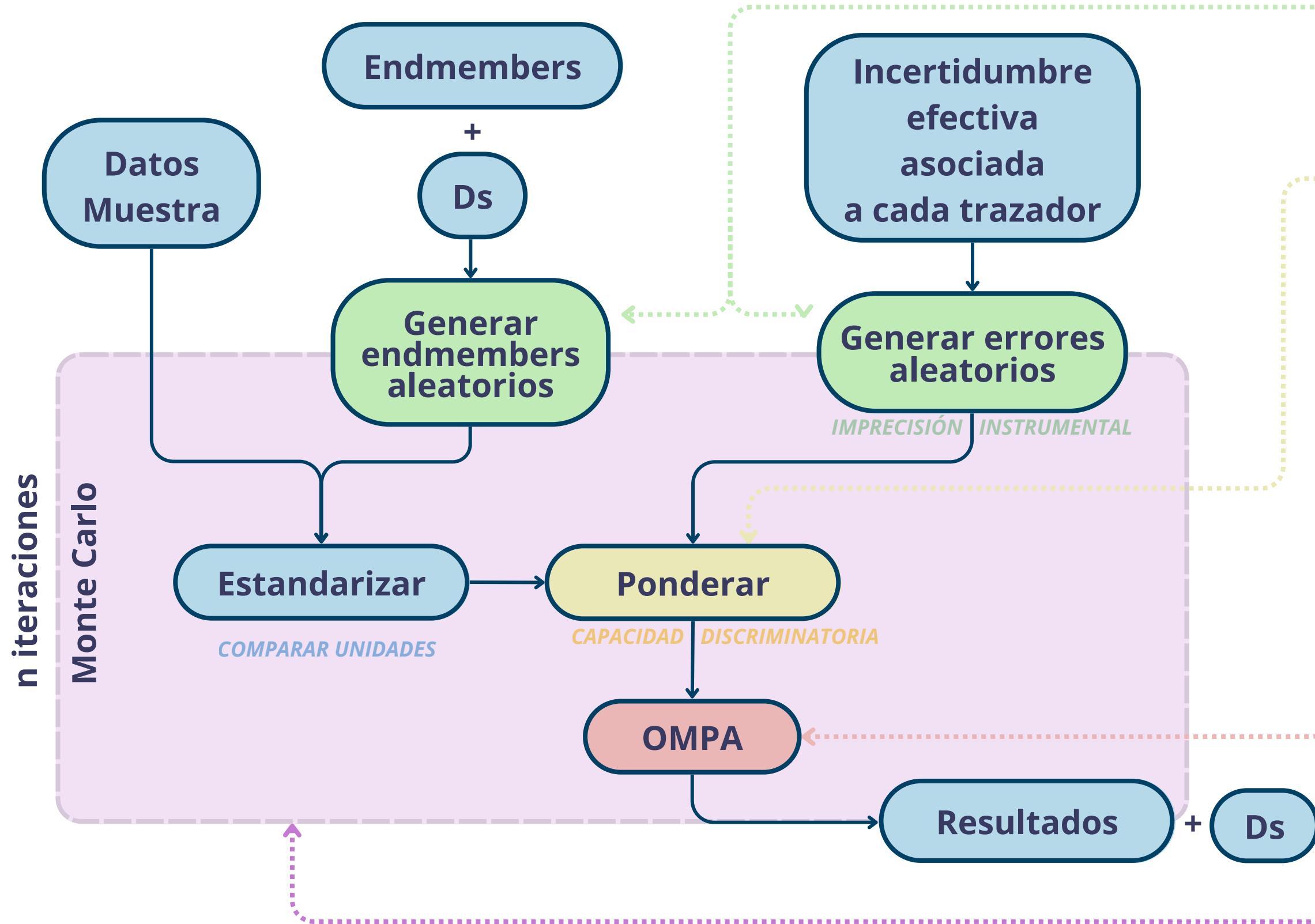
$NADW = \bar{y} \pm \varepsilon_y \%$

$NACW = \bar{z} \pm \varepsilon_z \%$

$MOW = \bar{x} \pm \varepsilon_x \%$

$=$

Desarrollo de la herramienta:



```

def generar_endmembers_y_errores(design_M, design_M_desvest, sig_errors):
    np.random.seed()
    design_M_values = design_M.iloc[:, 1:].apply(pd.to_numeric, errors='coerce').values
    design_M_desvest_values = design_M_desvest.iloc[:, 1:].apply(pd.to_numeric, errors='coerce').values
    endmembers = np.random.normal(design_M_values, design_M_desvest_values)
    matriz_endmembers = pd.DataFrame(endmembers, columns=design_M_desvest.columns[1:])
    sig_errors_random = np.random.normal(loc=sig_errors, scale=np.array(sig_errors) * 0.1)
    return matriz_endmembers, sig_errors_random
matriz_endmembers, sig_errors_random = generar_endmembers_y_errores(design_M, design_M_desvest, sig_errors)
    
```

```

def calcular_vector_ponderacion(design_M, n_WM, sig_errors, M):
    mean_sub = design_M.iloc[:, 1:1].sub(design_M.iloc[:, 1:1].mean(axis=1), axis=0)
    mean_sub_square = np.square(mean_sub)
    sigma_j = (mean_sub_square.sum(axis=1) / n_WM) ** 0.5
    W_vector = sigma_j ** 2 / sig_errors
    last_r = W_vector.shape[0]
    W_vector.loc[last_r] = M
    return W_vector
W_vector = calcular_vector_ponderacion(design_M, n_WM, sig_errors, M)
    
```

```

def calcular_ompa(W_design_std, W_data_std, design_columns):
    result = []
    residual = []
    err_percent = []
    for i in range(W_data_std.shape[0]):
        row_optim, res_optim = scipy.optimize.nnls(W_design_std, W_data_std.iloc[i,:])
        result.append(row_optim)
        residual.append(res_optim)
        err_percent.append(np.sum(row_optim) - 1)
    ompa_resultados = pd.DataFrame(result, columns=design_columns)
    ompa_resultados['error'] = err_percent
    return ompa
ompa_resultados = calcular_ompa(W_design_std, W_data_std, design_M.columns[1:1].values)
    
```

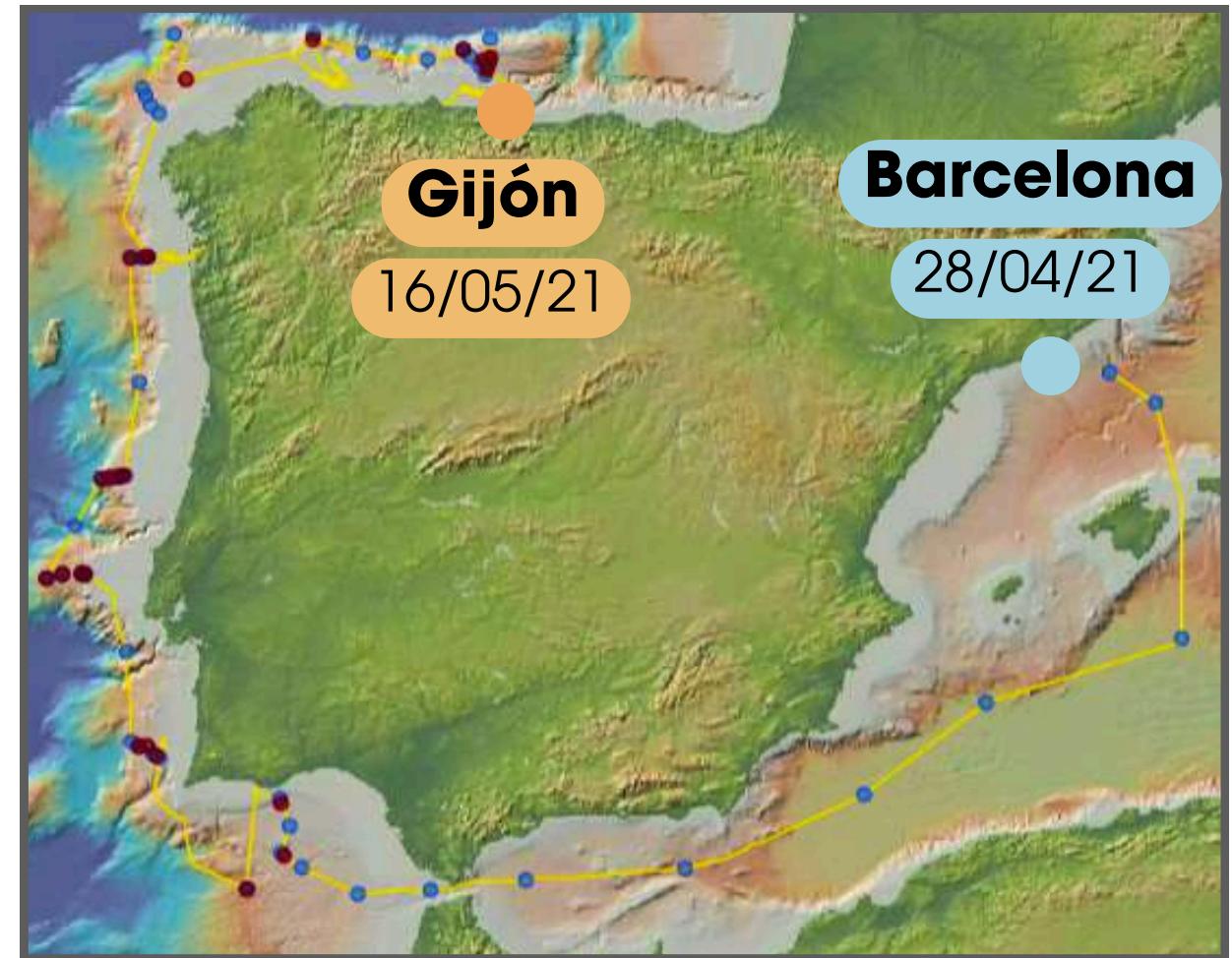
```

def montecarlo_ompa(n_simulaciones, design_M, design_M_desvest, sig_errors, M, n_WM, data):
    tabla_resultados = []
    lista_w_vectors = []
    for sim in range(n_simulaciones):
        print(f"Simulación {sim+1}/{n_simulaciones}")
        metadatos = data_t[[('Codi', 'Latitude', 'Longitude', 'Date', 'DEPTH', 'Bottom Depth')].reset_index(drop=True)
        matriz_endmembers, sig_errors_random = generar_endmembers_y_errores(design_M, design_M_desvest, sig_errors)
        design_std, data_std, _, _, _ = estandarizar_matrices(matriz_endmembers, data)
        W_vector = calcular_vector_ponderacion(design_M, n_WM, sig_errors_random, M)
        lista_w_vectors.append(W_vector.reset_index(drop=True))
        W_design_std, W_data_std = ponderar_matrices(design_std, data_std, W_vector, M)
        ompa_resultados = calcular_ompa(W_design_std, W_data_std, design_M.columns[1:1].values)
        ompa_resultados = pd.concat([metadatos, ompa_resultados], axis=1)
        ompa_resultados.insert(0, "Simulacion", sim + 1)
        print(ompa_resultados)
        tabla_resultados.append(ompa_resultados)
    n_simulaciones=1000
    tabla_resultados_ompa, lista_w_vectors = montecarlo_ompa(n_simulaciones, design_M, design_M_desvest, sig_errors, M, n_WM, data)
    
```



Descripción de la campaña:

- Datos de la campaña **TRANSMOW (2021)**:
 - Recogidos entre Barcelona y Gijón (28 abril - 16 mayo).
→ Perfiles de **CTD** de la columna de agua



Datos utilizados:

- **39** estaciones hidrográficas exclusivamente **atlánticas**



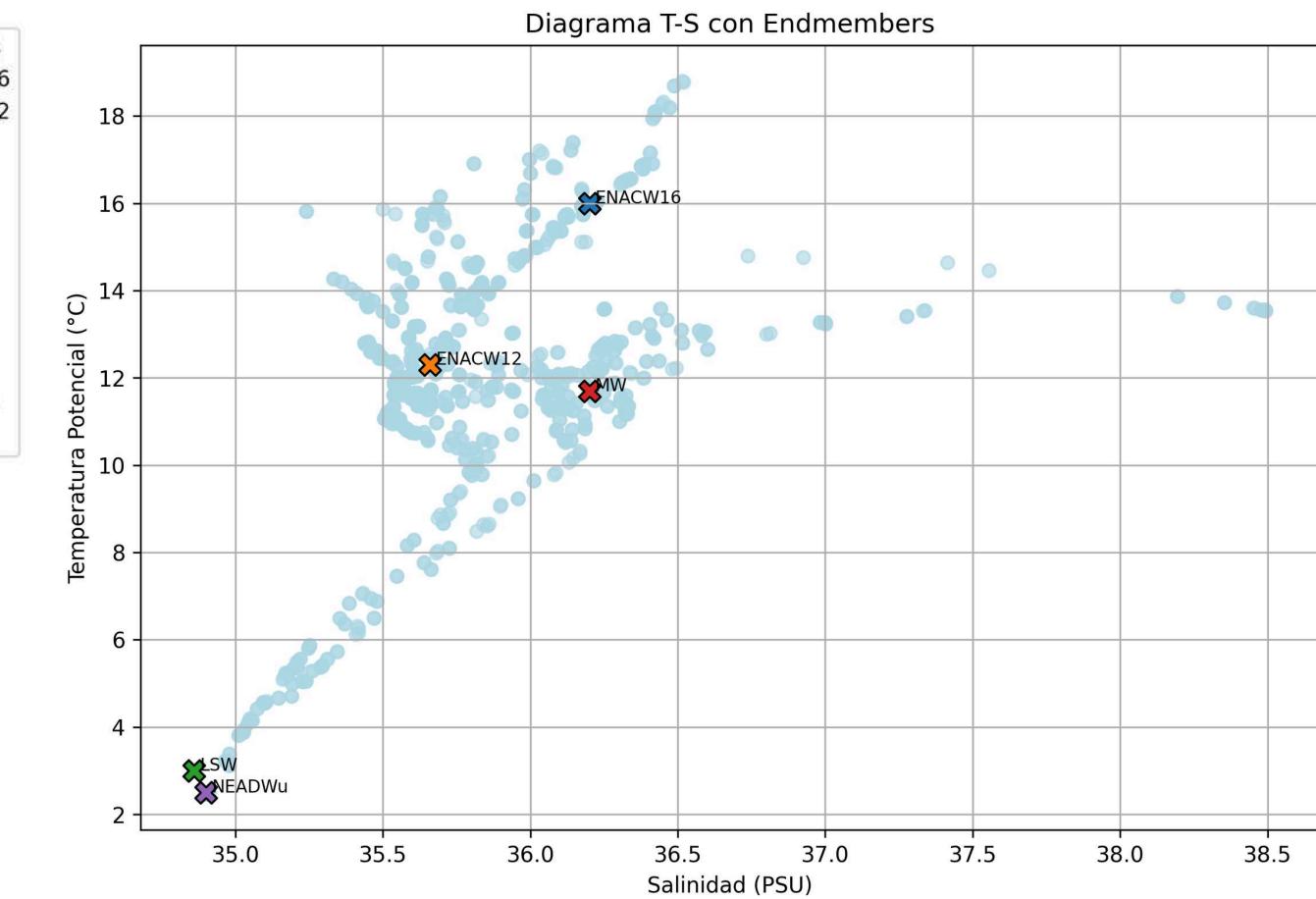
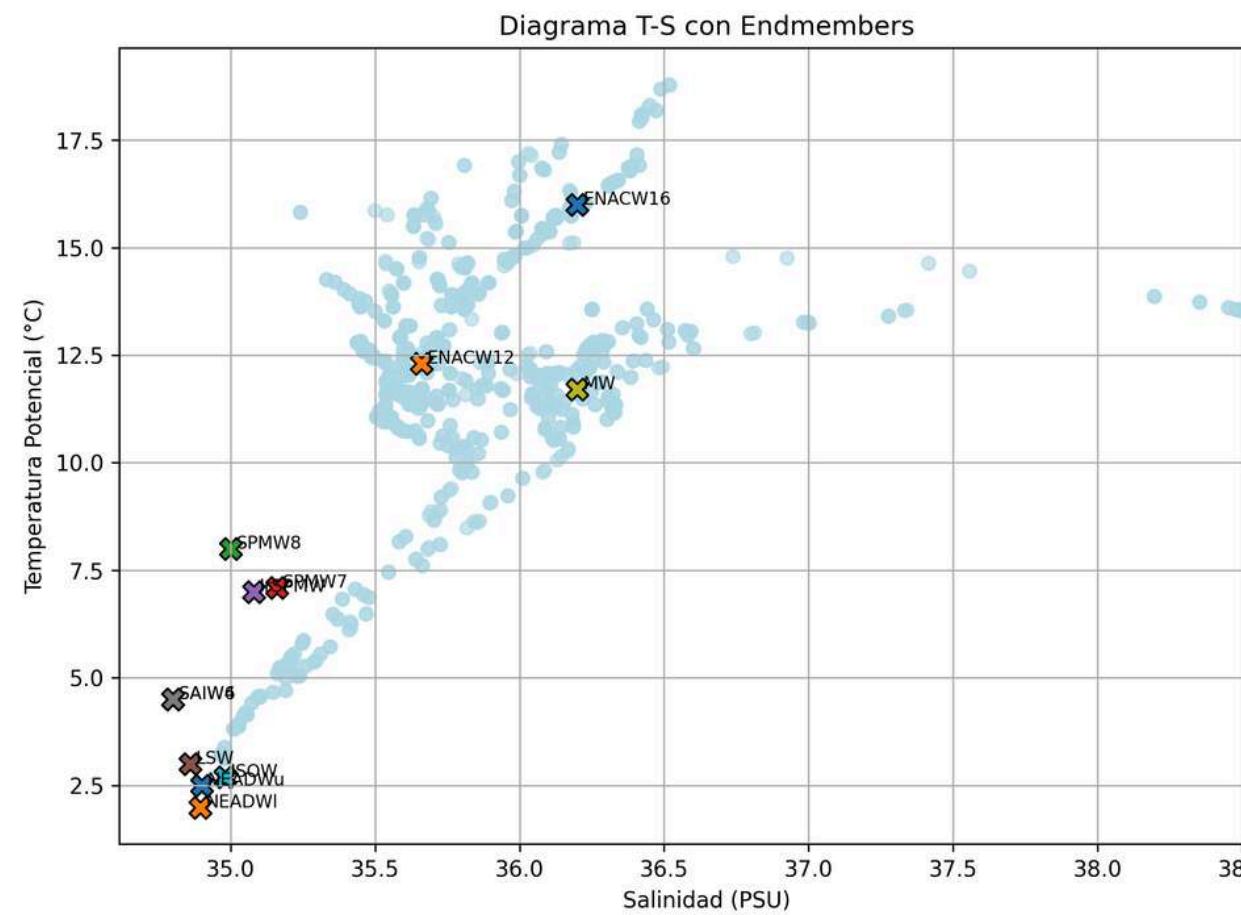
Perfiles CTD

Botellas Niskin

Codi	Date	Longitude	Latitude	Pressure (dbar)	θ (°C)	S _p (PSU)	Oxygen (μmol/kg)	Depth (m)
ST11_1	May 03 2021	-7.7467	36.3431	1035.0	12.96	36.5802	185.7	1025.0
ST11_2	May 03 2021	-7.7467	36.3431	1034.0	12.98	36.5832	185.9	1024.0
ST11_3	May 03 2021	-7.7467	36.3431	928.0	13.05	36.5905	187.0	920.0
ST11_4	May 03 2021	-7.7467	36.3431	929.0	13.06	36.5933	187.2	920.0
ST11_5	May 03 2021	-7.7467	36.3431	857.0	13.08	36.5726	188.1	849.0
ST11_6	May 03 2021	-7.7467	36.3431	857.0	13.08	36.572	188.1	849.0
ST11_7	May 03 2021	-7.7467	36.3431	805.0	13.10	36.5105	189.7	798.0
ST11_8	May 03 2021	-7.7467	36.3431	805.0	13.10	36.5127	189.7	798.0
ST11_9	May 03 2021	-7.7467	36.3431	757.0	12.91	36.4187	189.0	750.0
				36.3431	757.0	36.4184	188.8	750.0



Definición de endmembers para la zona de estudio



Definición de parámetros iniciales

Endmembers + Ds

García-Ibáñez et al. (2018).

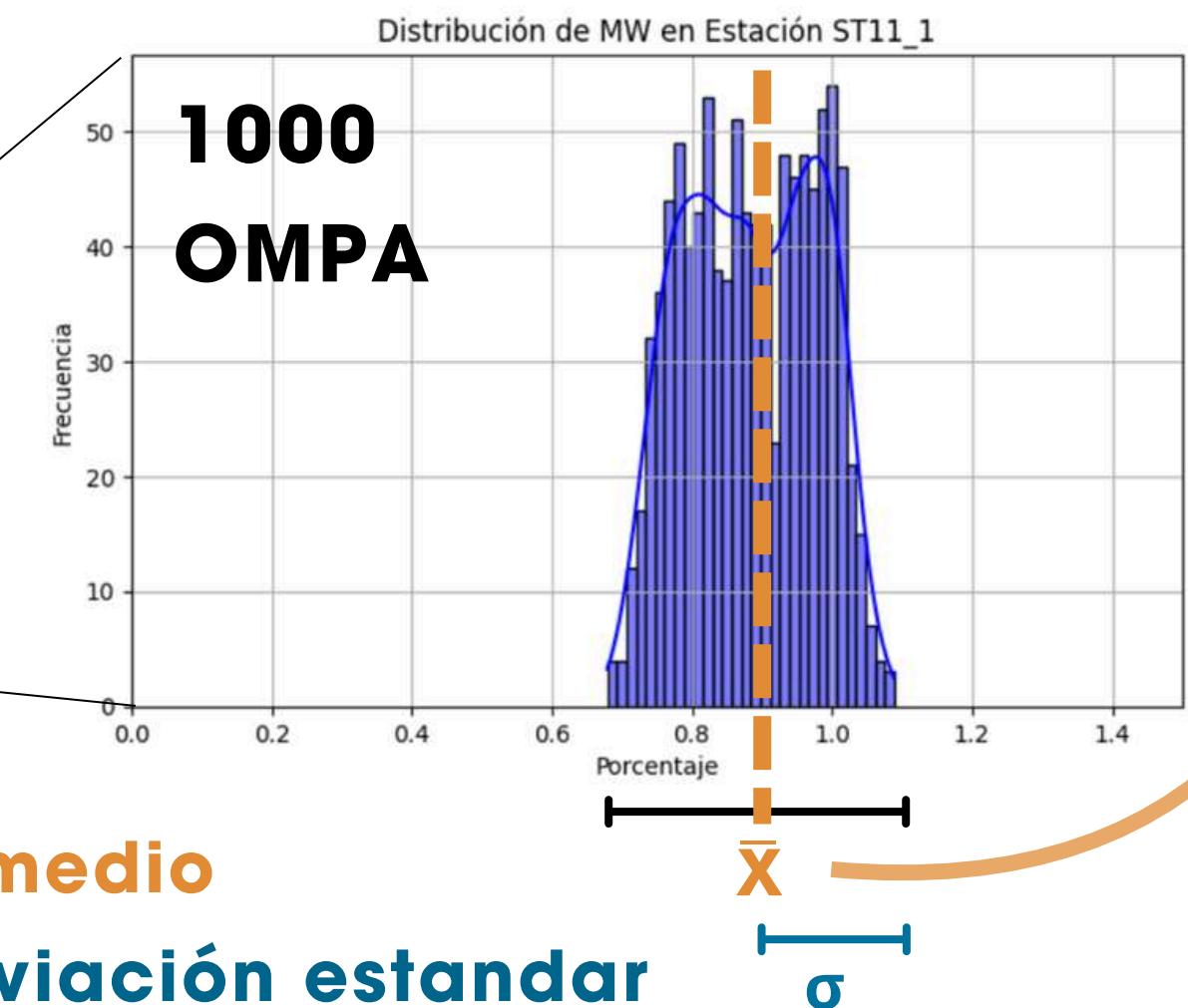
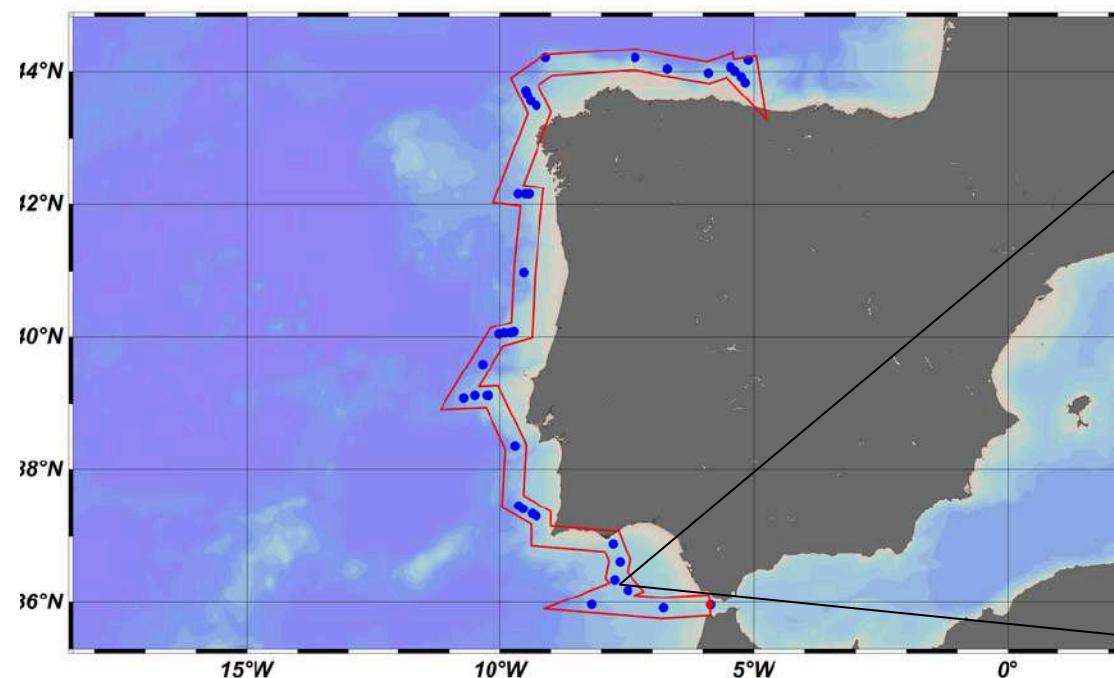
Variable	<i>ENACW₁₆</i>	<i>ENACW₁₂</i>	<i>MW</i>	<i>LSW</i>	<i>NEADWu</i>
Salinity	36.20 ± 0.060	35.66 ± 0.060	36.50 ± 0.07	34.86 ± 0.010	34.94 ± 0.070
Potential Temperature	16.00 ± 0.600	12.30 ± 0.600	11.70 ± 0.20	3.400 ± 0.400	2.50 ± 0.500
Oxygen ($\mu\text{mol/kg}$)	246.00 ± 8.00	251.00 ± 8.00	190.00 ± 6.00	307.00 ± 50.00	274.00 ± 8.00
Spiciness	3.420 ± 1.368	2.070 ± 0.621	2.55 ± 0.51	0.340 ± 0.034	0.120 ± 0.006

Incertidumbre asociada a trazador:

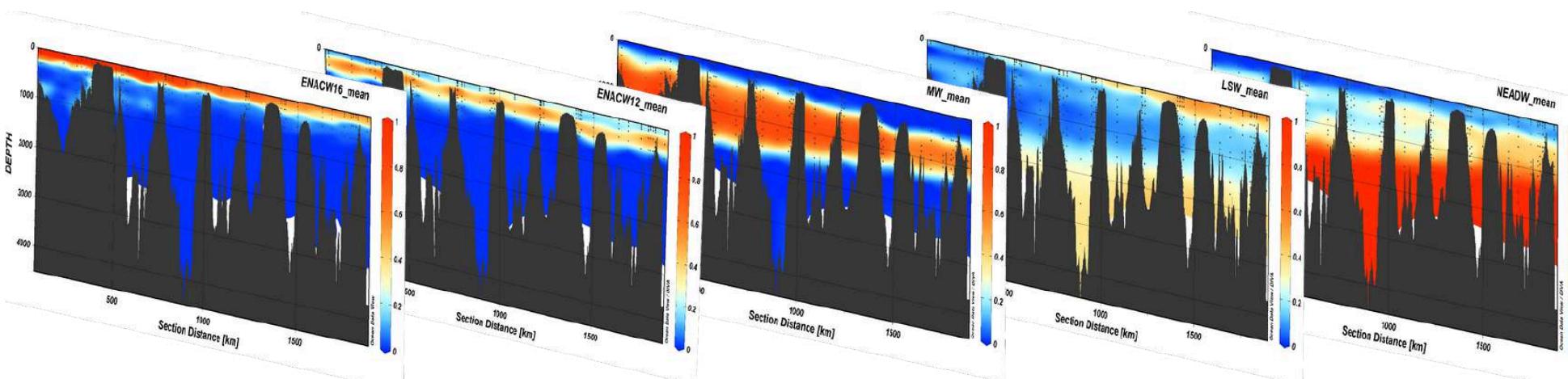
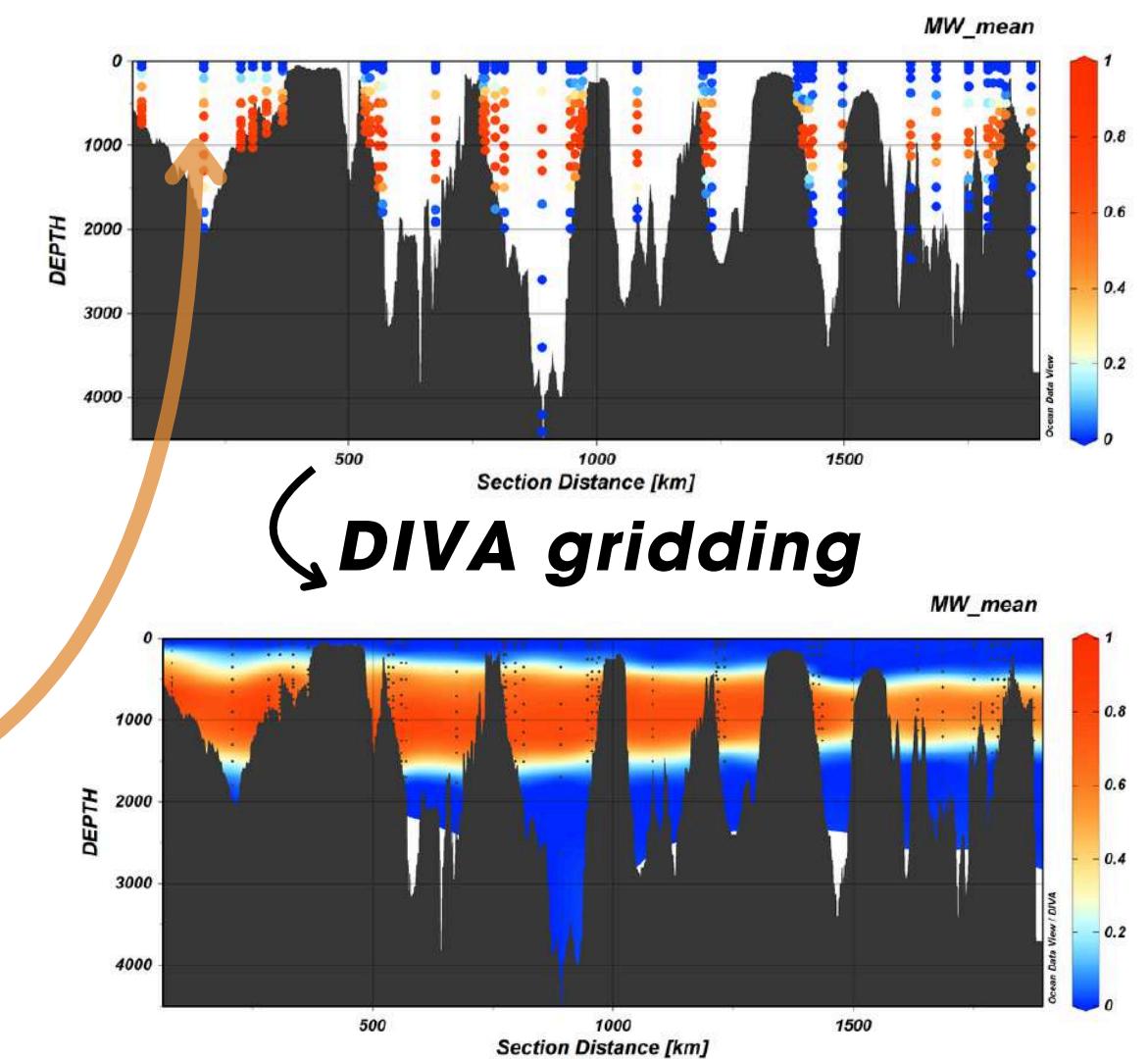
- 0.004 (°C) Temperatura
- 0.02 (PSU) Salinidad
- 1.5 ($\mu\text{mol/kg}$) Oxígeno
- 0.005 Spiciness.

Resultados: Cálculo de estadísticas

→ Representación en el Ocean Data View



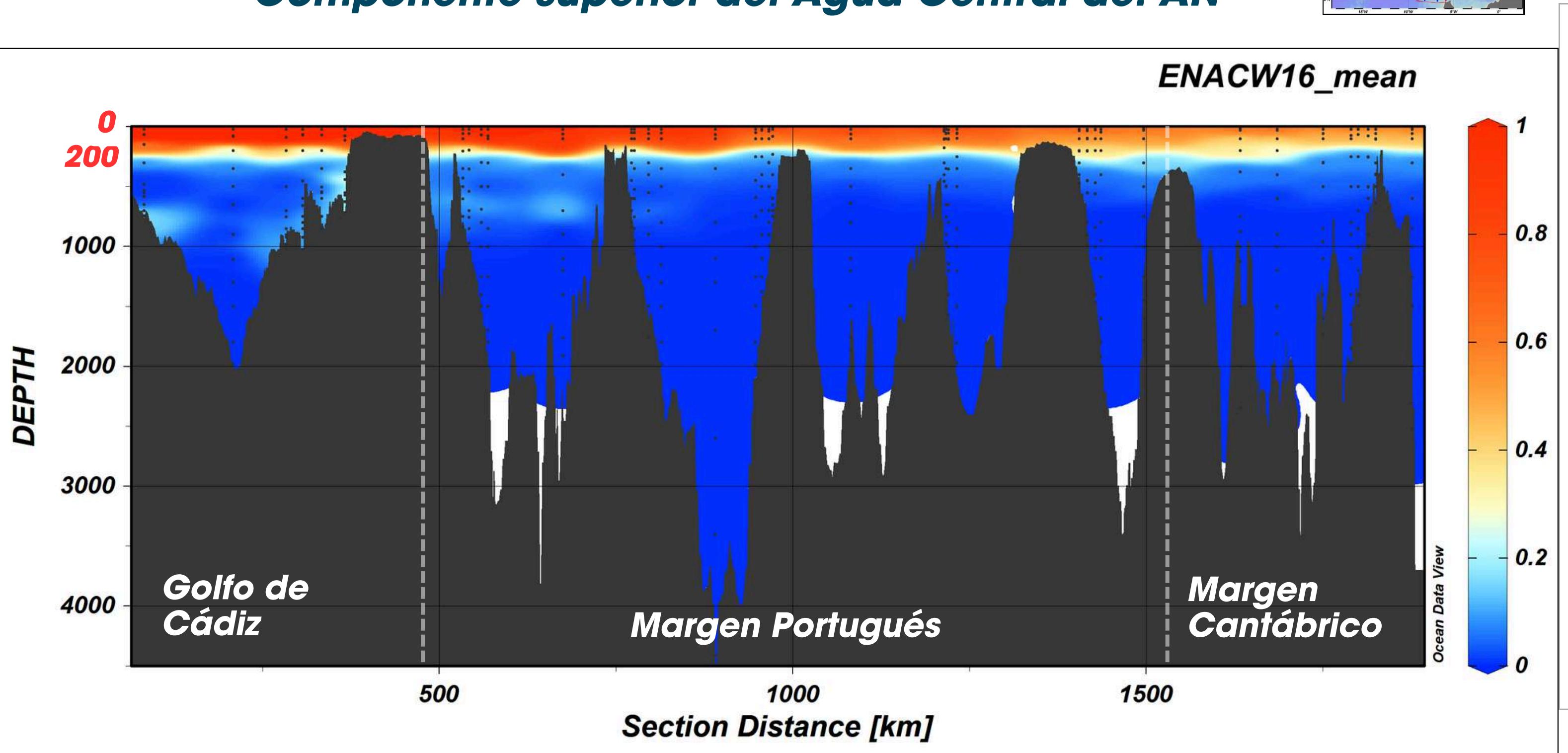
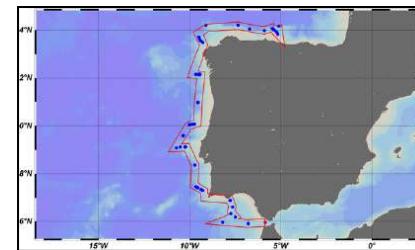
Para cada muestra → Promedio → Desviación estandar



← Para cada endmember

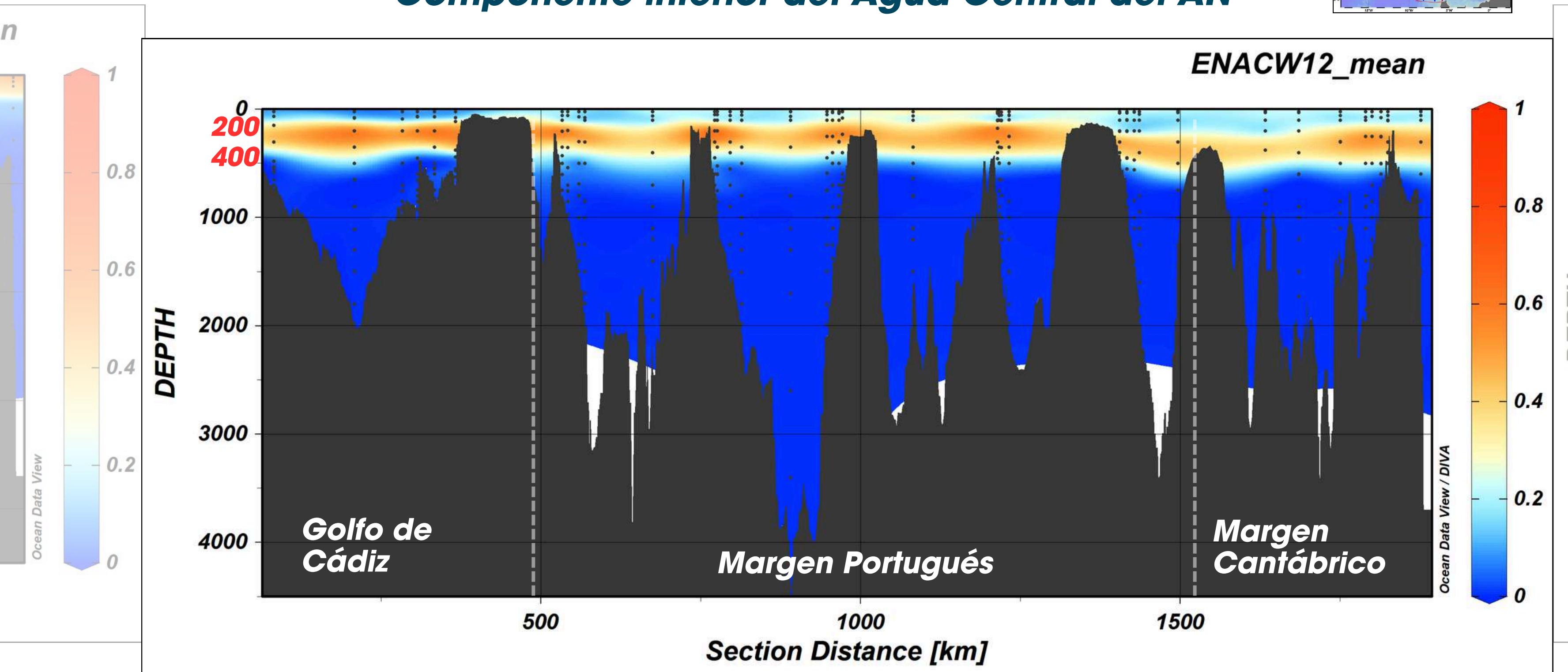
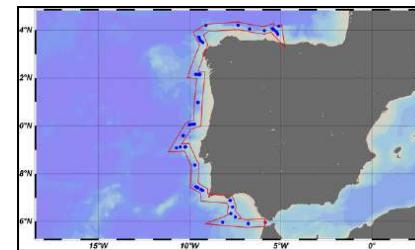
Resultados: *Distribución espacial de masas de agua*

Componente superior del Agua Central del AN



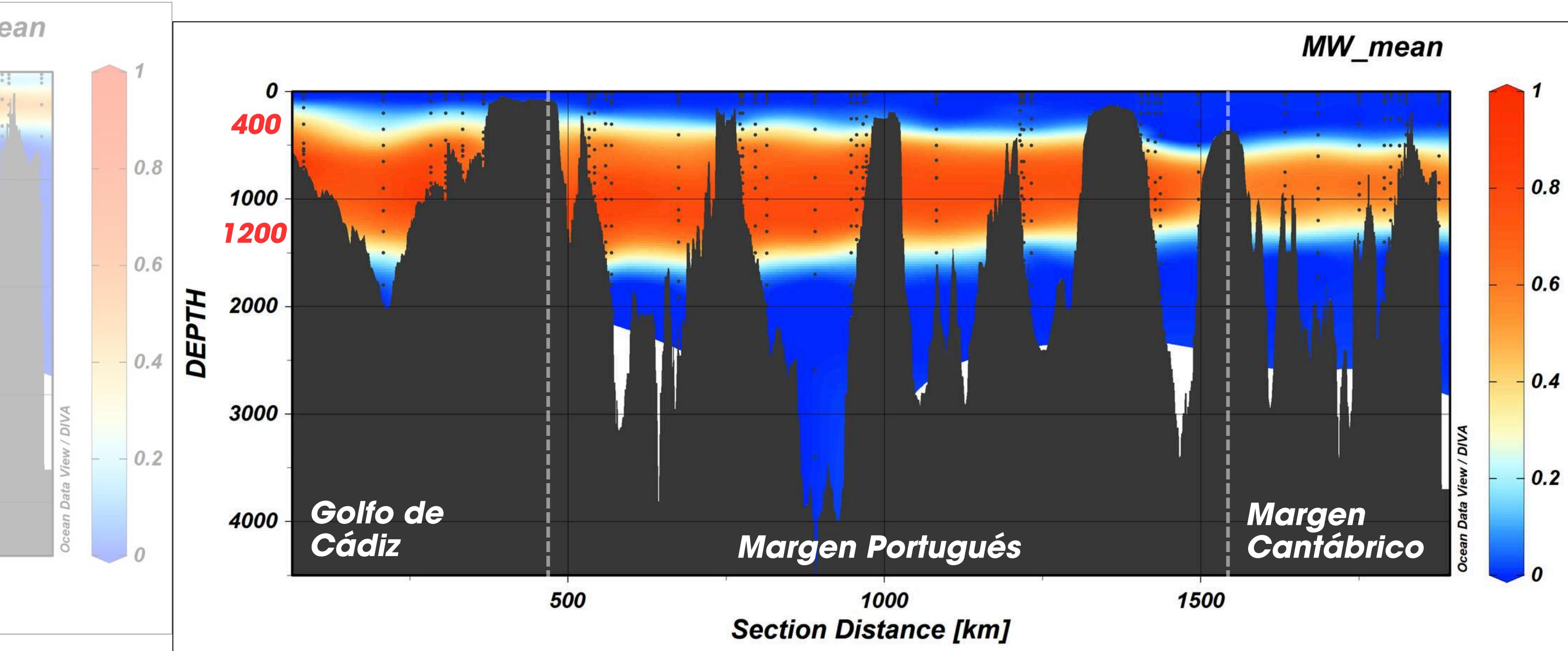
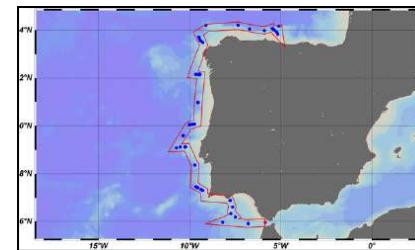
Resultados: *Distribución espacial de masas de agua*

Componente inferior del Agua Central del AN



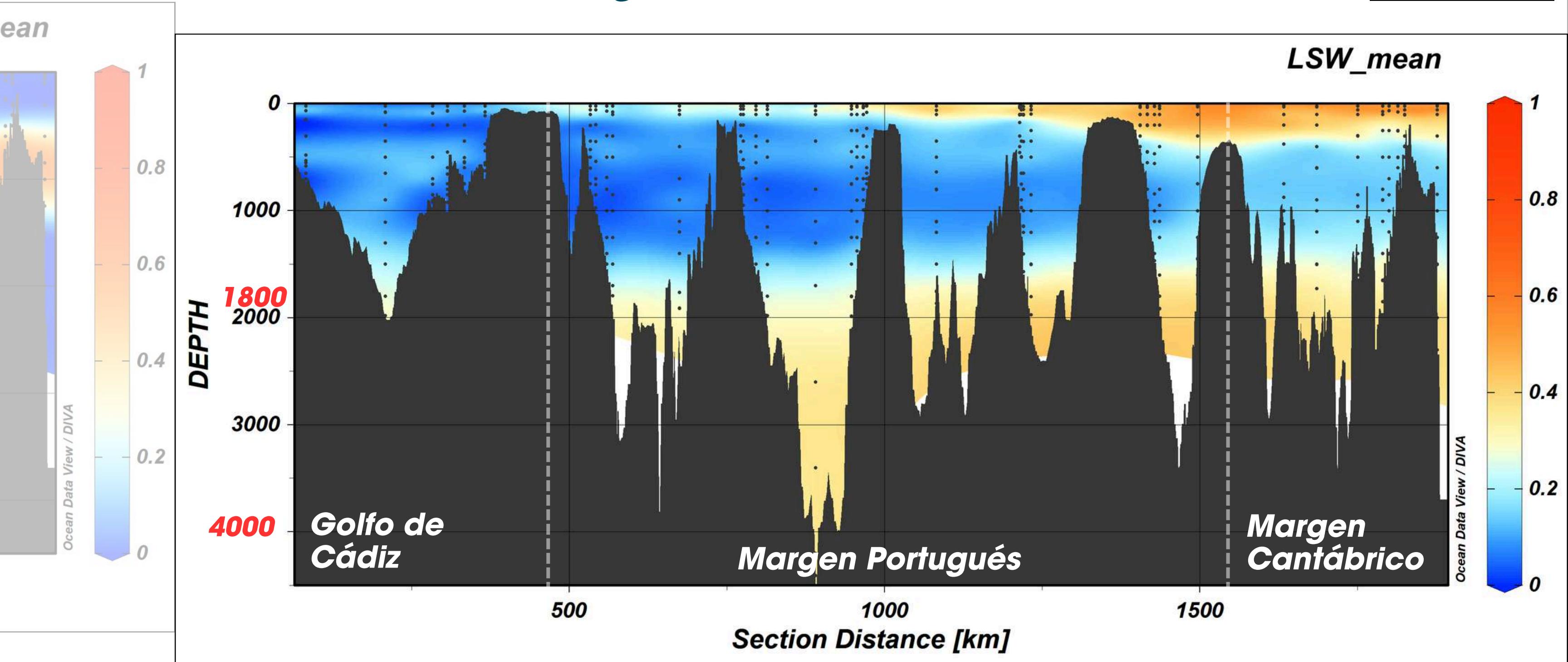
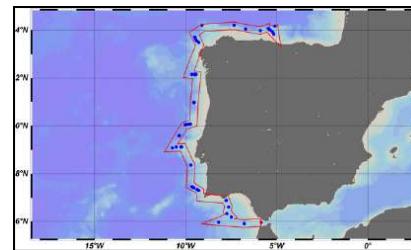
Resultados: Distribución espacial de masas de agua

Agua Mediterránea



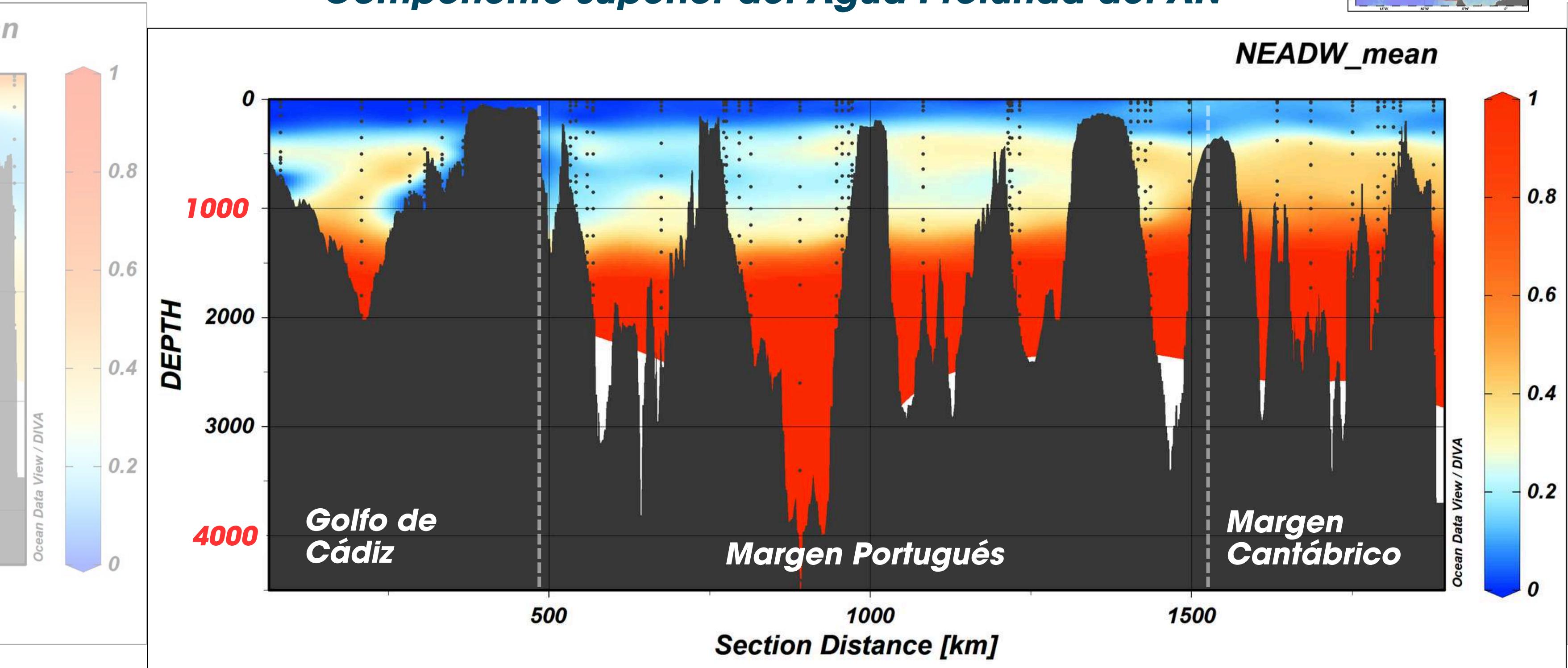
Resultados: *Distribución espacial de masas de agua*

Agua del Mar del Labrador



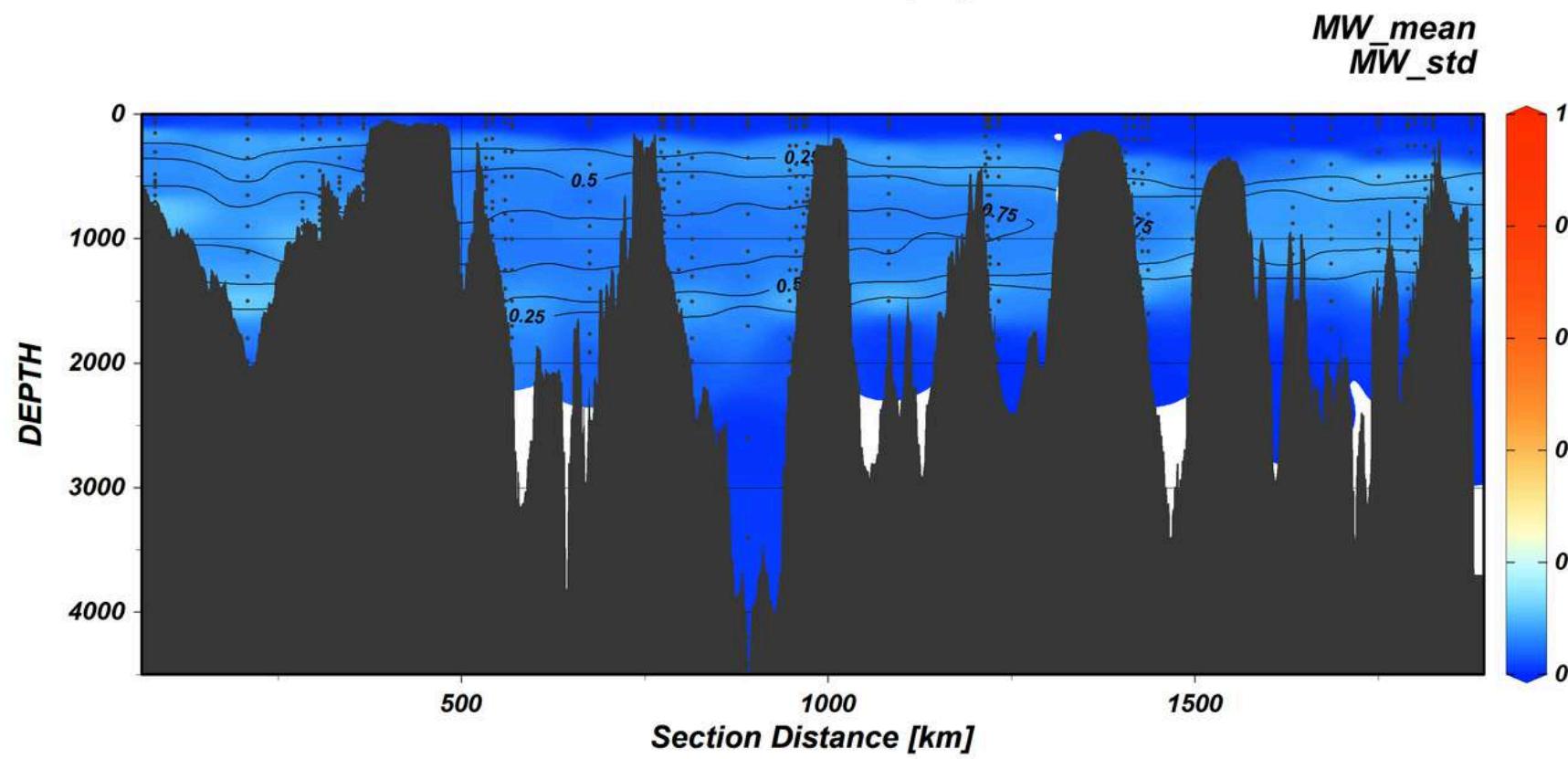
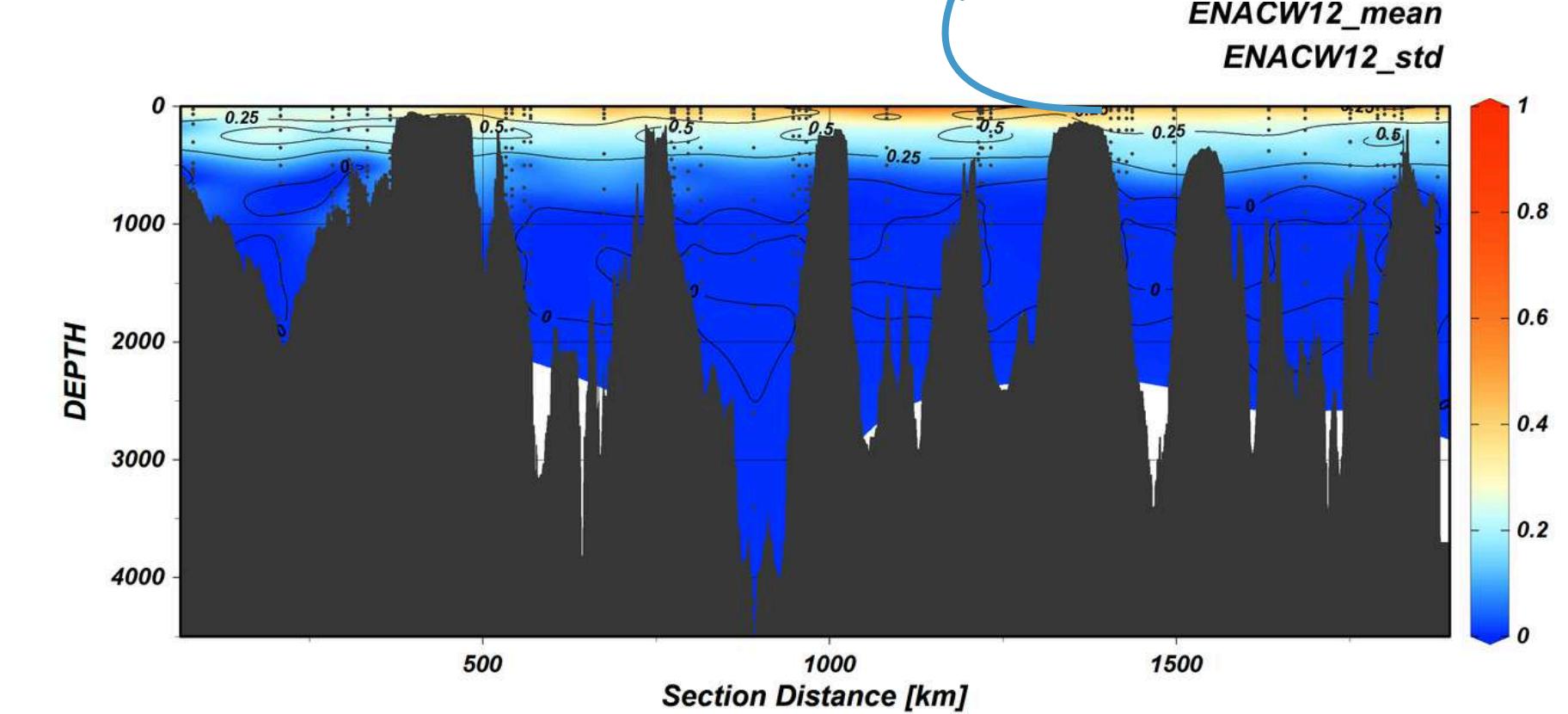
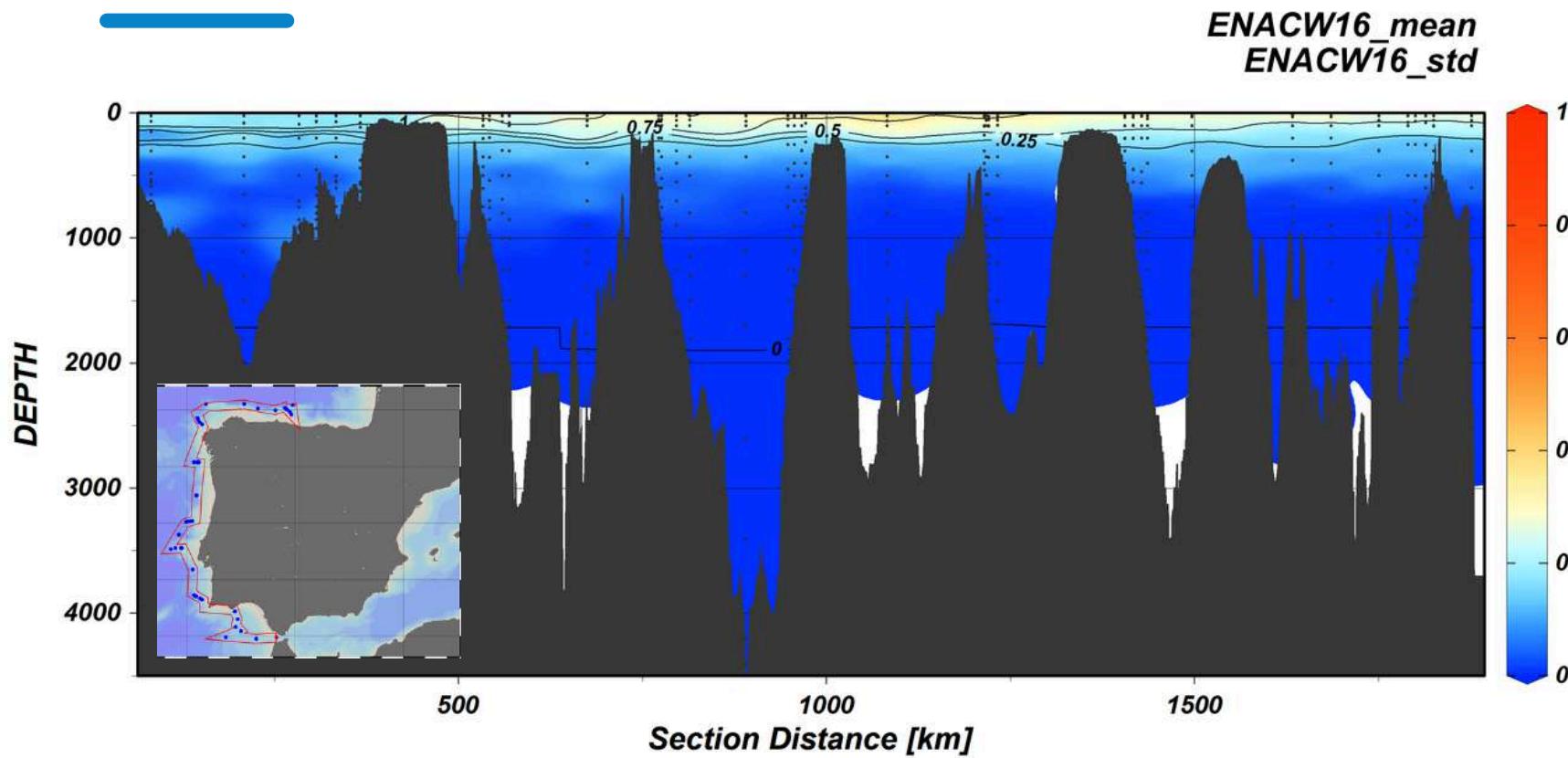
Resultados: *Distribución espacial de masas de agua*

Componente superior del Agua Profunda del AN



Resultados: Evaluación de la incertidumbre

Mayor variabilidad natural en superficie

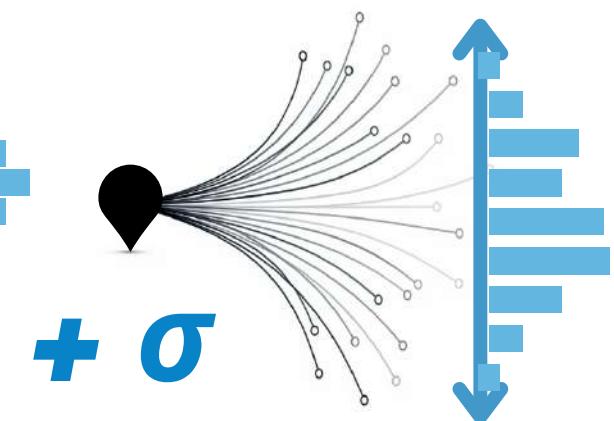


Convergencia

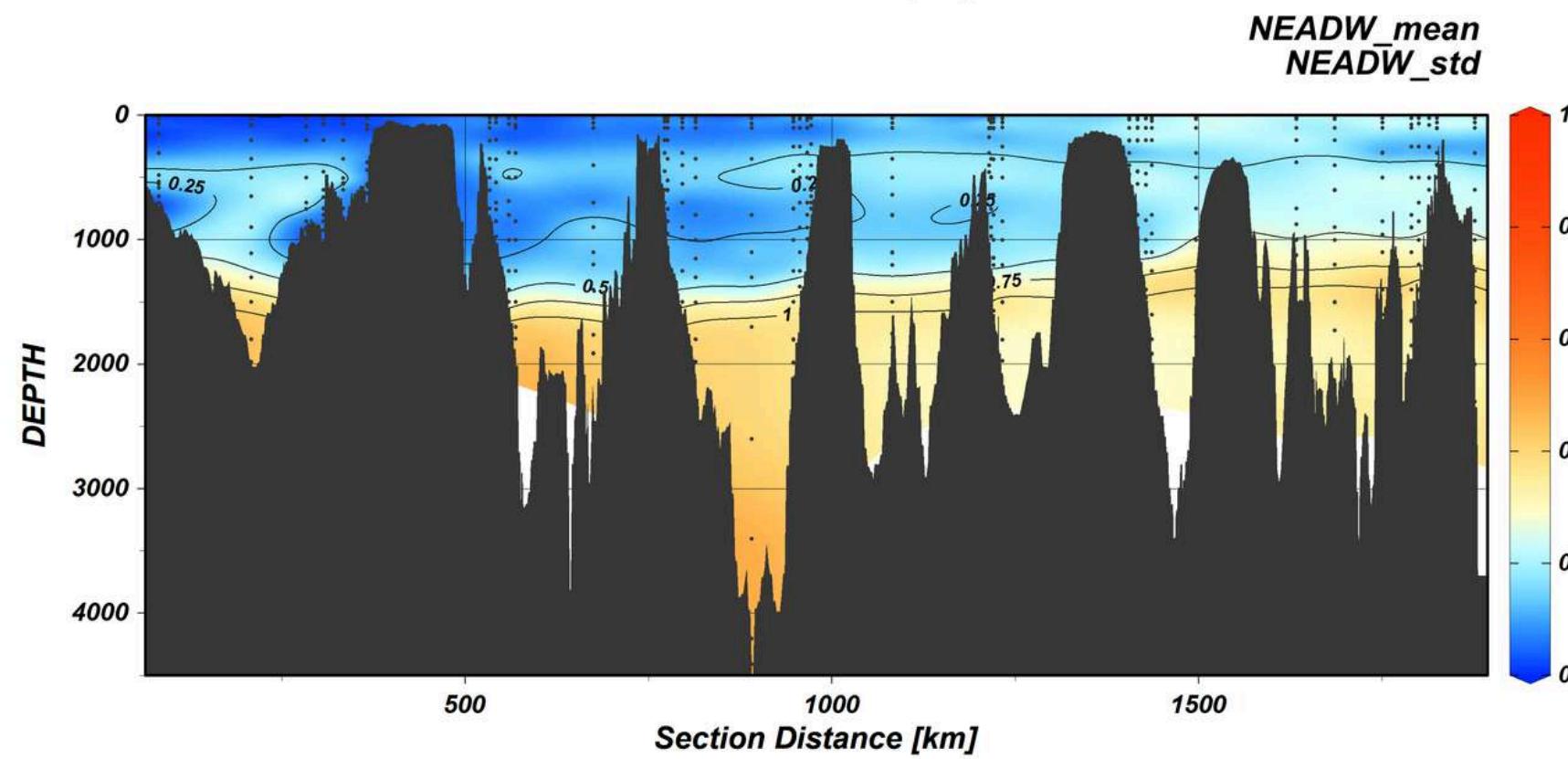
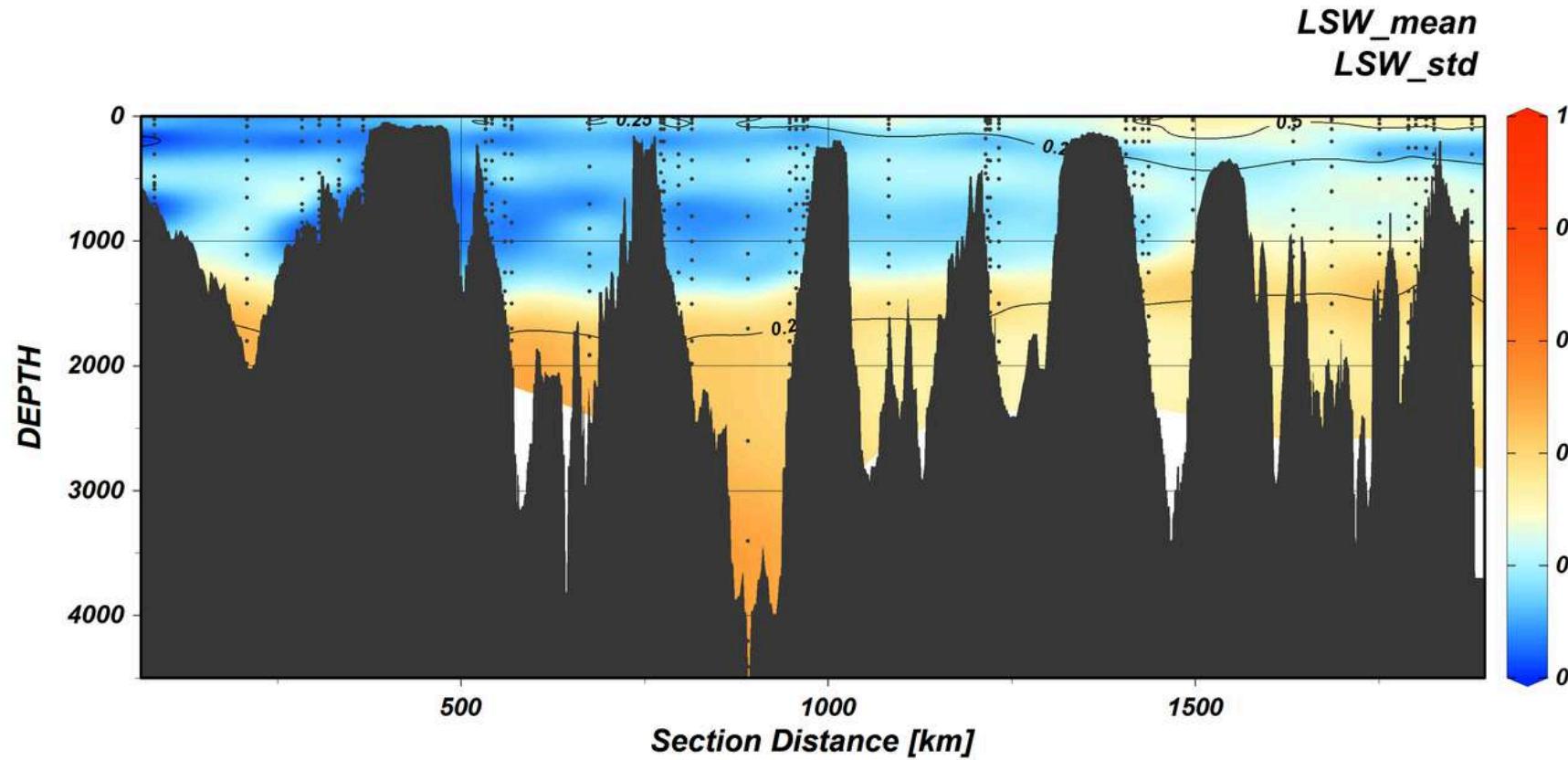


+ Fiable

Divergencia

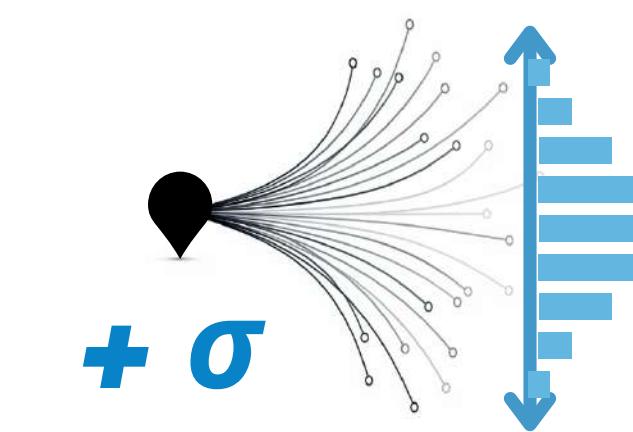


Resultados: Evaluación de la incertidumbre



Masas más **profundas incertidumbres** pueden alcanzar hasta un **50%** en ciertos tramos de profundidad.

Divergencia



- Fiable

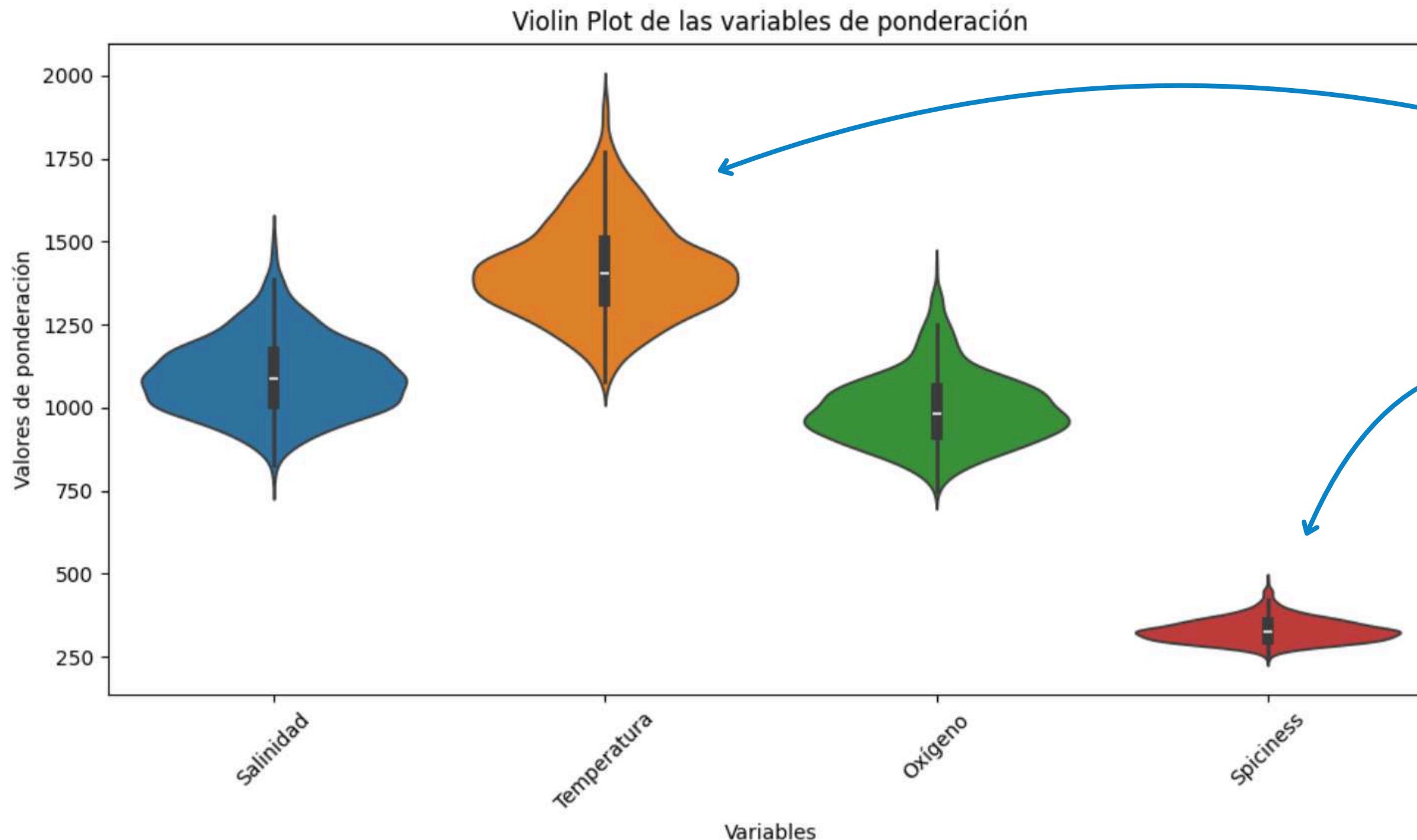
Convergencia



+ Fiable

Resultados: Análisis de Pesos de Trazadores

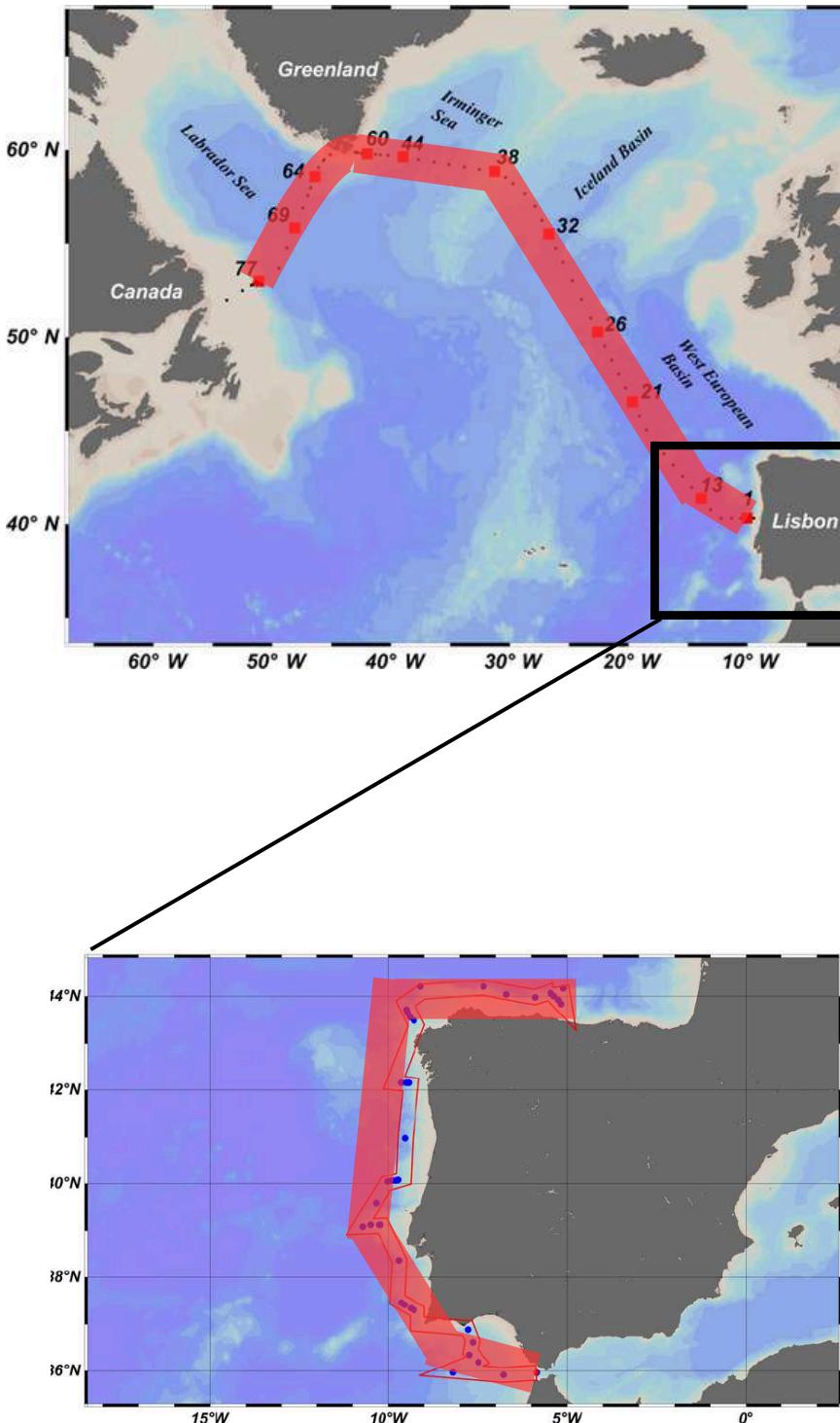
Muestran la **distribución** de **pesos** por trazador



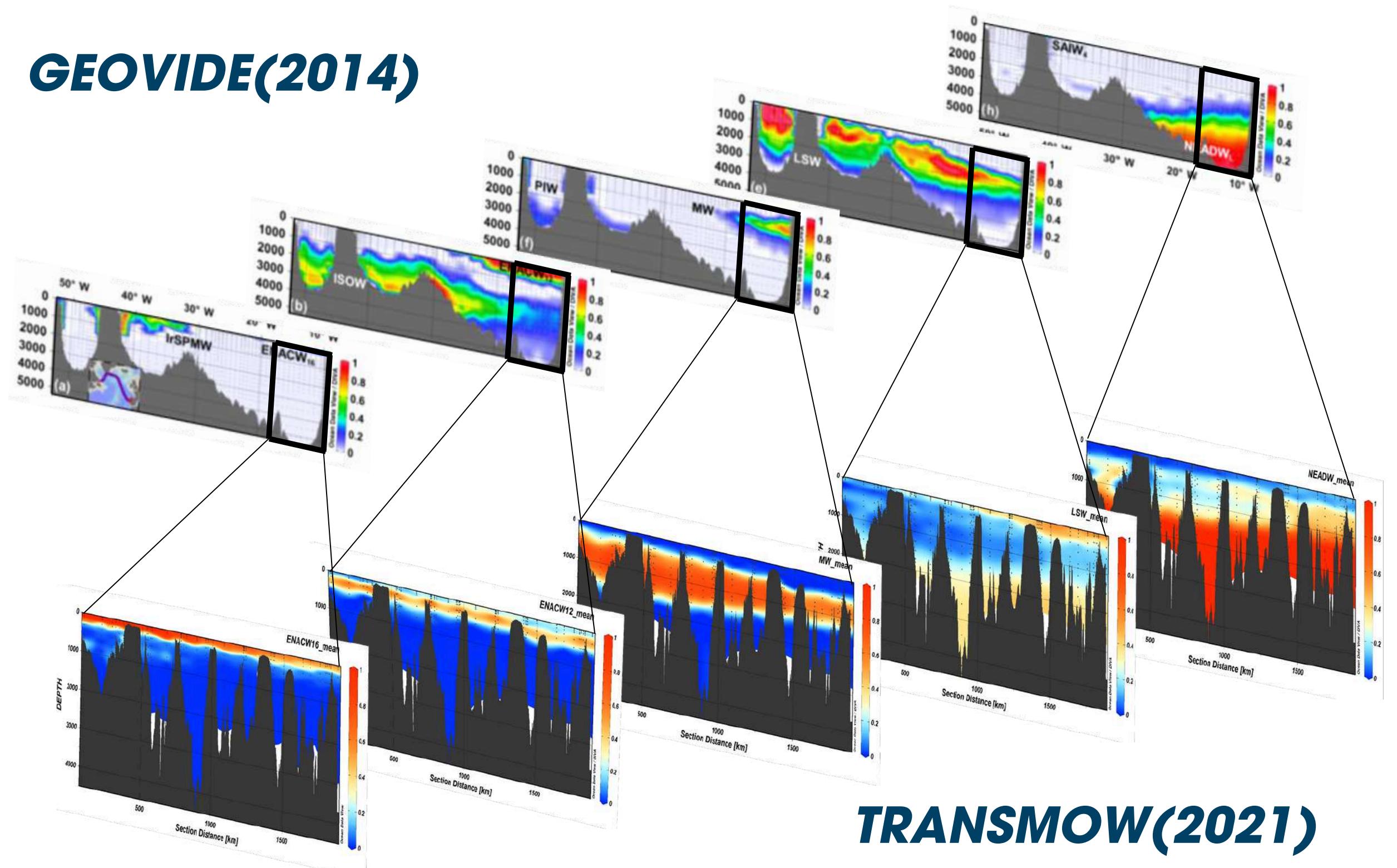
¿Qué **parámetros** son mas **importantes** para el **OMPA**?

Permite **identificar** si se esta **subestimando** algún **trazador** que sí que puede ser **útil** en la **discriminación** de masas de agua.

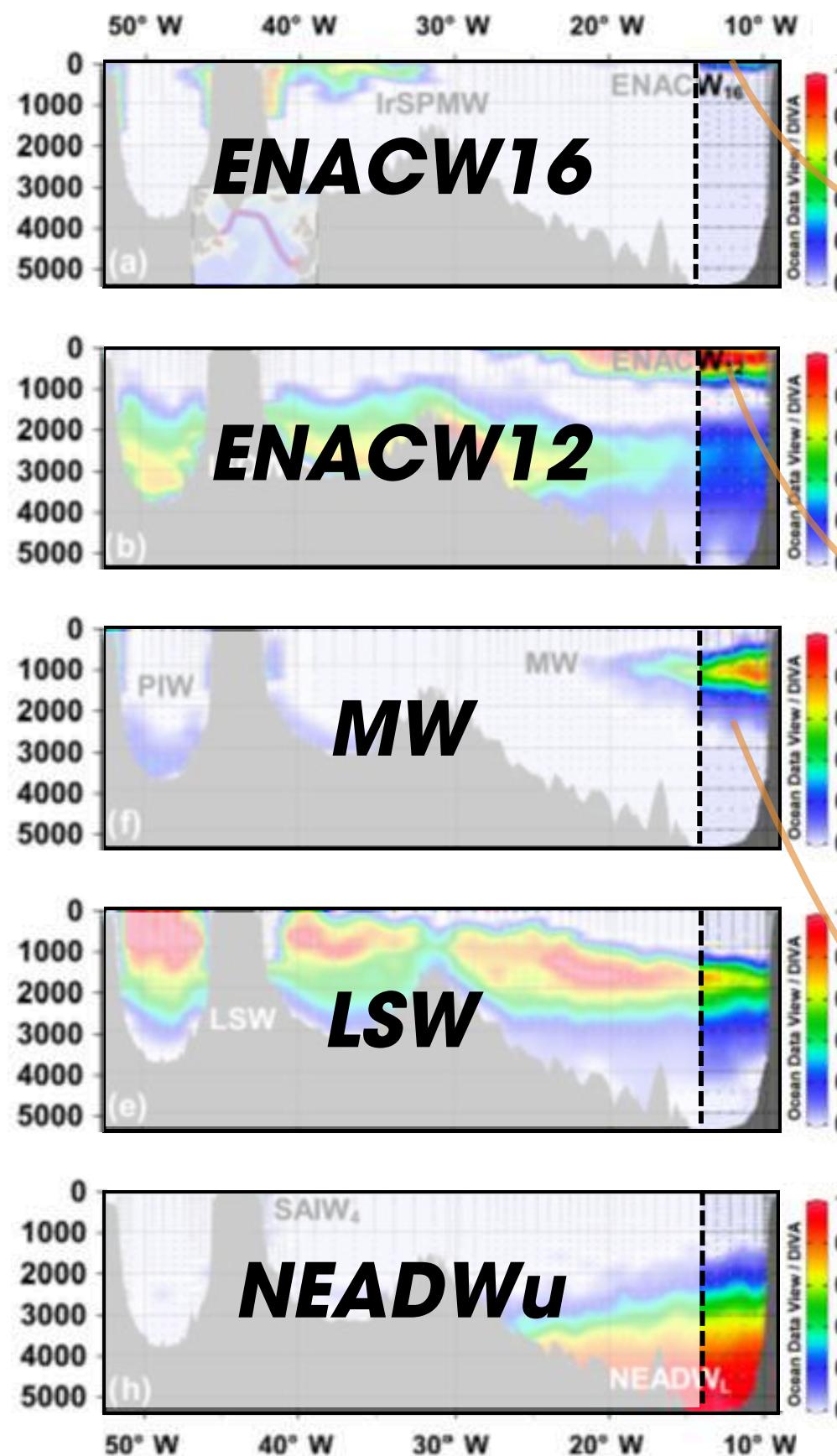
Comparación con estudios previos *García-Ibáñez et al. (2018)*



GEOVIDE(2014)

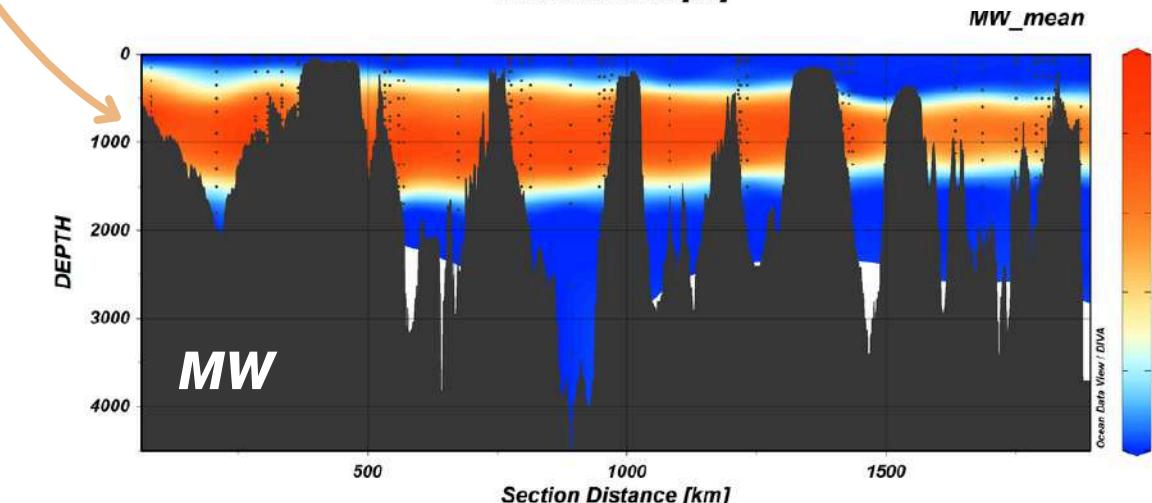
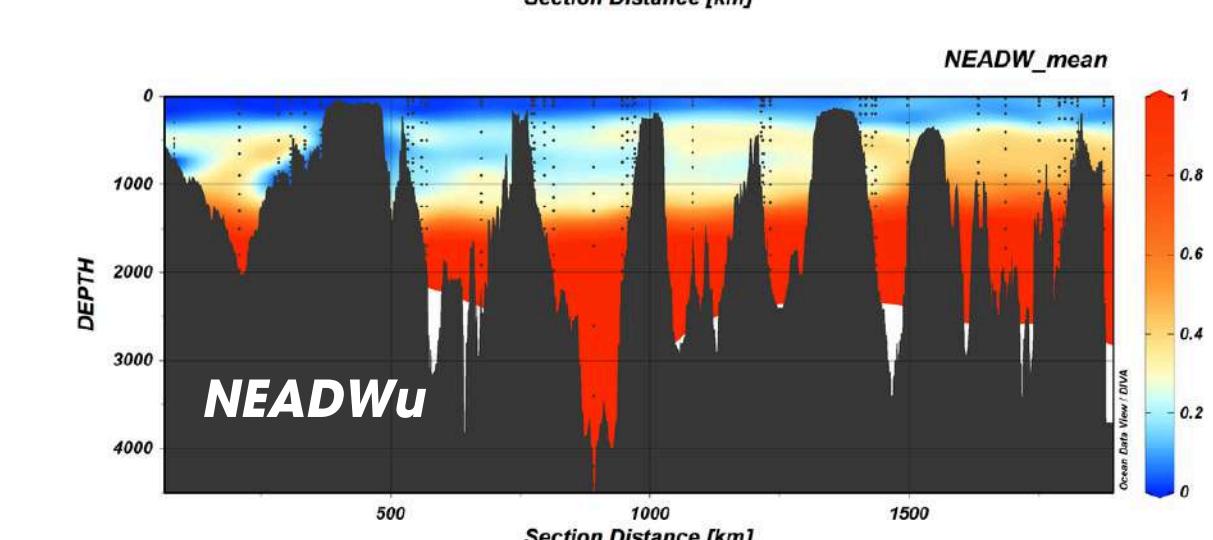
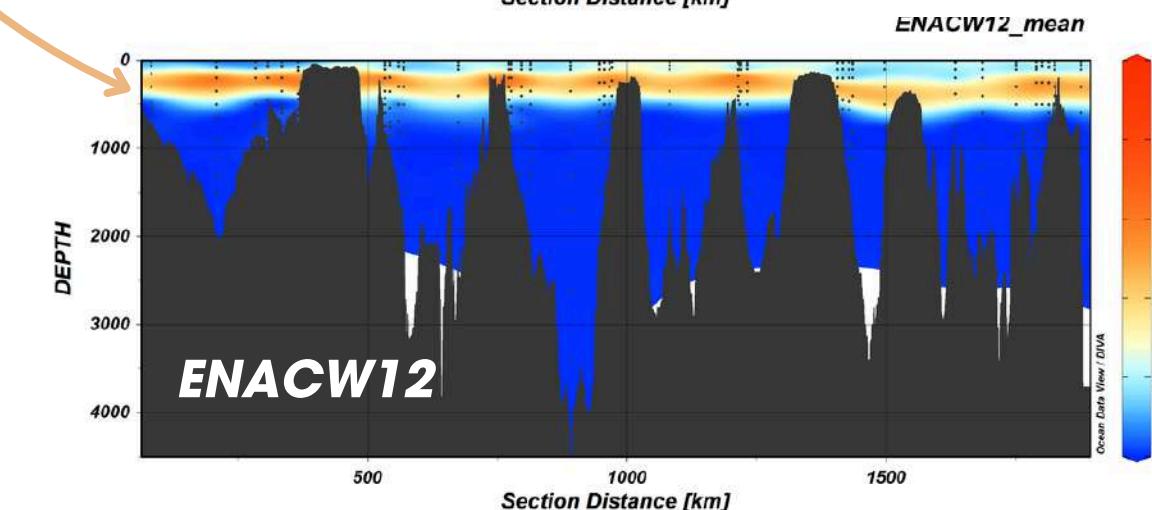
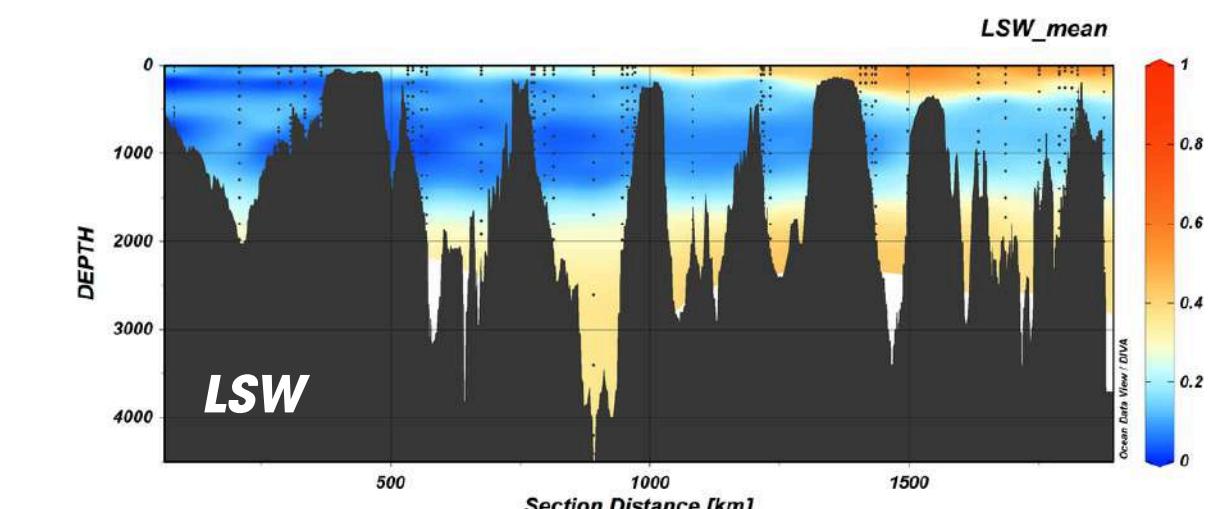
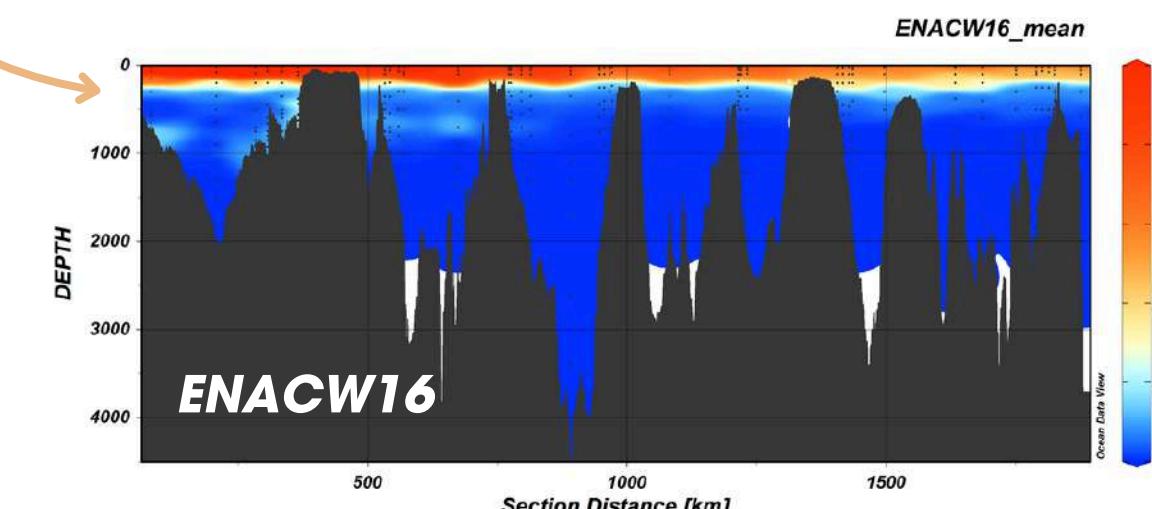


TRANSMOW(2021)



Resultados

Fracción promedio de contribución de cada masa de agua



Superposición (1500 y 3000 m)

2 Hipótesis

Similitud real
Ausencia de la
Masa de LSW

Representación 3D (S-T-Ox) Para evaluar si: Superposición

Similitud real
Ausencia de la
Masa de LSW

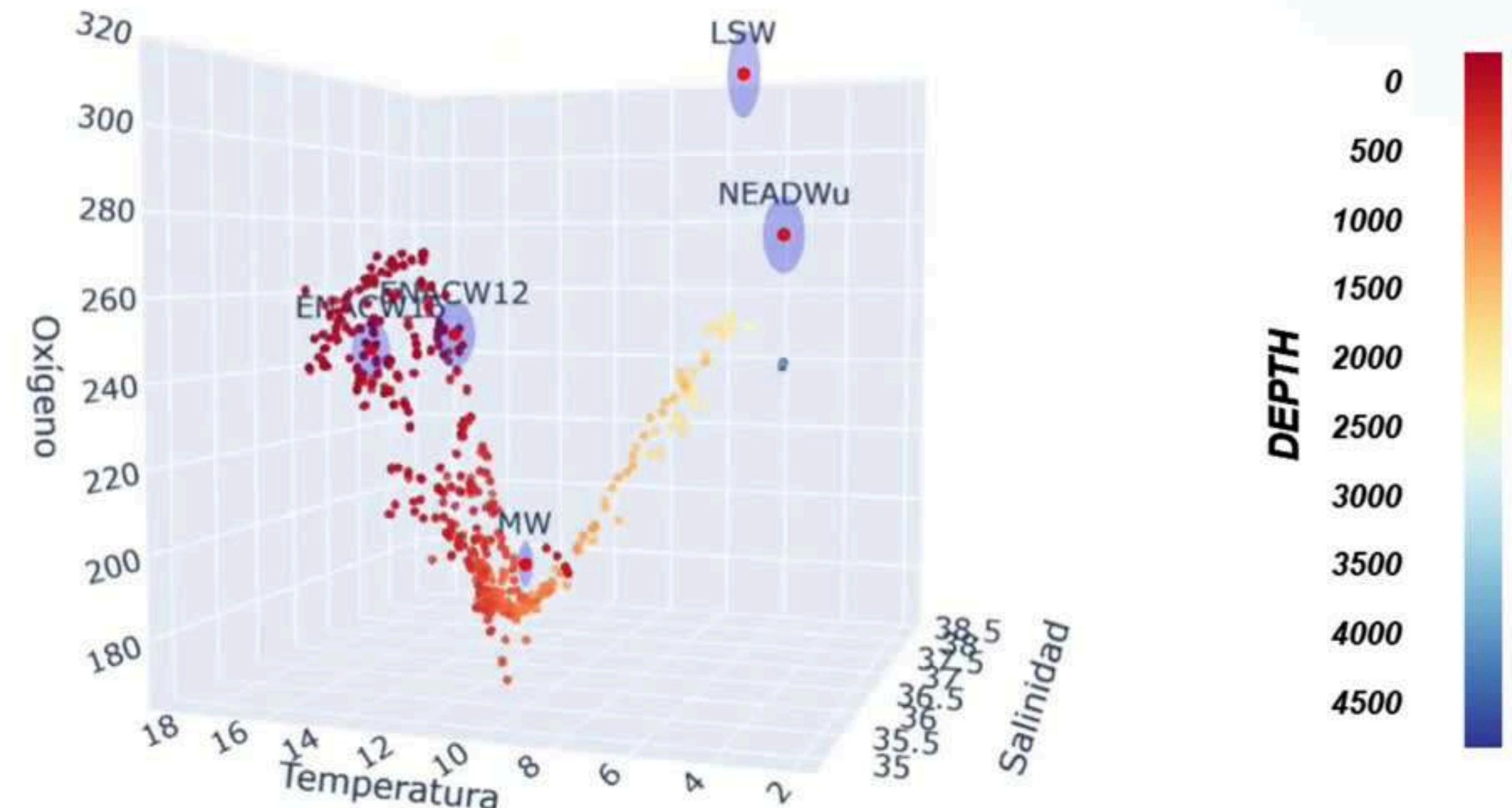
El **LSW** aparece **desplazado**, fuera de este núcleo principal de datos.

Sugiere que la **contribución** real del **LSW** en la zona es **mínima**



Explicaría:

Por qué el modelo tiene dificultades para identificarlo correctamente



Conclusiones:

1. El modelo OMPA-MC **reproduce patrones** de mezcla coherentes con la estructura hidrográfica regional y **estudios previos**.

2. La integración de **Monte Carlo**, supone una mejora sustancial respecto al OMPA clásico.

OMPA
clásico

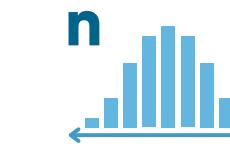


{
T
S
Ox
}

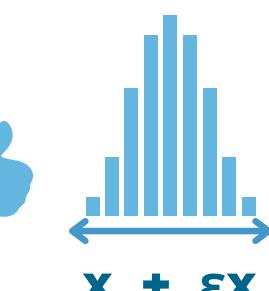
x% ?



OMPA-MC



{
T ± εT
S ± εS
Ox ± εOx
}



→ Rompe el enfoque **determinista clásico**.

→ Reduce la **subjetividad** del modelo.

→ Capturar la **variabilidad natural** de las masas de agua.

→ Facilitando una **visualización** más **realista** del sistema oceánico.

→ Proporciona una **cuantificación** explícita de la **incertidumbre asociada** a cada solución.

→ Permite **evaluar la idoneidad** de los **endmembers** seleccionados.

En conjunto la herramienta desarrollada tiene un gran potencial

Future work

Limitaciones actuales

- El modelo solo usa **4** trazadores.
- Esto **reduce** la **resolución** del análisis.
- **Más variables** permitirían **distinguir** mejor las masas profundas.

Problemas de agrupación

- Masas de agua con **propiedades muy similares** pueden **acabar agrupadas**.
- Esto **reduce** la **precisión** en zonas donde coexisten.

Prioridad de trazadores

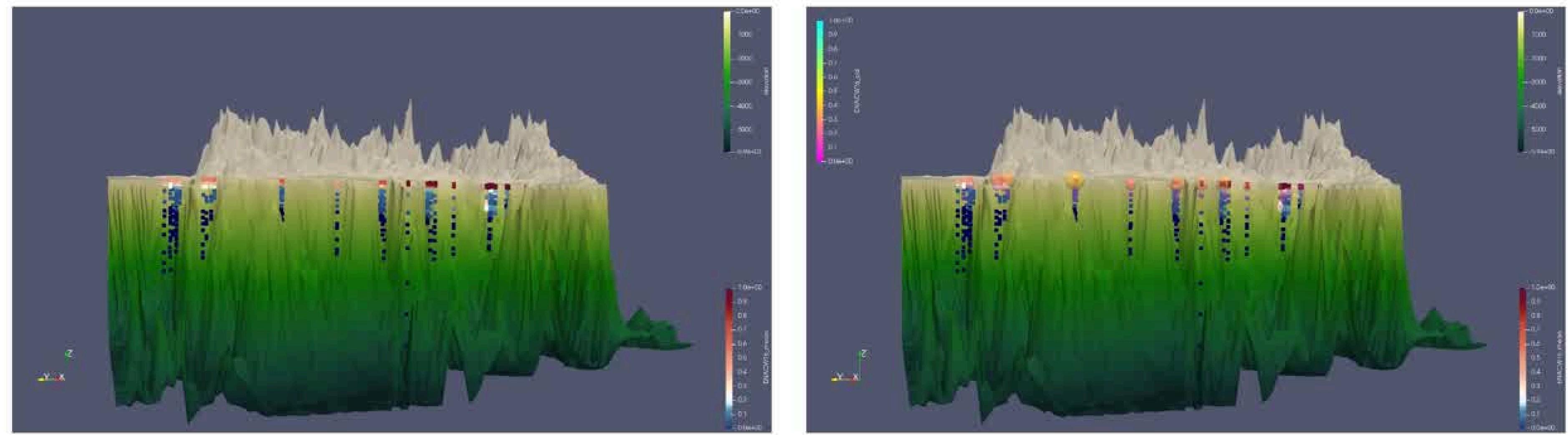
- Algún trazador clave puede quedar subestimado.
- Esto puede **ocultar** discriminaciones.

Asunción de conservatividad

- El modelo asume que **todos** los **trazadores** son **conservativos**.
- No siempre es cierto.

Visualización 3D

Eastern North Atlantic Central Water 16



GRÁCIAS
POR SU ATENCIÓN