



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Ciències
de la Terra

TRABAJO FINAL DE GRADO

Desarrollo de una Herramienta
Computacional para la **Optimización**
del Análisis **OMPA** de Mezclas de Masas
de Agua mediante Técnicas **Monte**
Carlo: Aplicación en la Campaña
TRANSMOW.

Grado de Ciencias del Mar
Universidad de Barcelona

Por:

Aitana Tomás San Martín

Tutor:

Leopoldo D. Pena González

Fecha:

Junio de 2025

Agradecimientos

A lo largo de este camino académico, he descubierto no solo lo que me apasiona, sino también lo difícil que puede ser compartir una pasión. Aunque estudio rodeada de personas comprometidas, rara vez encuentro espacios —dentro o fuera del aula— donde conversar de forma amena y genuina sobre temas científicos. Esta especie de rechazo intelectual ha generado en mí una sensación de aislamiento, como si una parte fundamental de quien soy no tuviera espacio para expresarse.

No se trata solo de desinterés por lo científico, sino de una falta de curiosidad y de profundidad en las conversaciones cotidianas. Esa ausencia de diálogo reflexivo ha sido, en muchos momentos, una fuente constante de frustración. Echo en falta conversaciones auténticas, algo que se aleje de la banalidad que predominan en mi día a día. Me gusta mucho reírme, pero más me apasiona reflexionar, cuestionar y explorar ideas con quienes también encuentran placer en pensar. Por todo esto, y demás razones, tengo unas ganas inaguantables de emprender mi camino laboral para trabajar, compartir y aprender con —y de— personas a las que les apasione lo que hacen tanto como a mí.

Pero por suerte, en medio de este mar de conversaciones superficiales, siempre ha habido un refugio esperándome al otro lado de la puerta de casa: mi padre. Gracias, papá, por ser de las pocas personas dispuestas a mojarse en esta tormenta de ideas que llevo dentro, por ofrecerme una escucha genuina y una conversación apasionada cuando más la necesitaba. Gracias por mirarme con esos ojos llenos de curiosidad, que parecen gritar por comprender cada detalle de todo lo que hago. Porque sin ti, no solo este camino habría sido mucho más solitario, sino que probablemente lo habría recorrido con una sensación persistente de impotencia, al no poder compartir con nadie que no solo entienda lo que digo, sino que también comprenda —con el mismo nivel de profundidad e interés— la importancia de lo que estamos comentando.

Igualmente, gracias, mamá, por tu apoyo constante y silencioso, por preguntarme cada día cómo me ha ido, aunque el tema no te apasione tanto como a mí. Gracias por esas llamadas que interrumpen, con ternura, esas jornadas frente al ordenador, cuando pierdo la noción del tiempo enfocada en mi trabajo. Sé que soy intensa, tozuda e impaciente —y probablemente muchos adjetivos más que no hace falta listar aquí—, pero tú siempre has sabido estar, sin condiciones ni reproches, cuando yo nunca he sabido. Gracias, mamá, porque, aunque no compartas mi mundo, siempre lo has celebrado como si fuera tuyo.

También quiero agradecer a mi abuela, siempre pendiente con su infaltable “¿qué tal los estudios?”, y por mantenerme con la barriga llena en los días en los que se me olvidaba hasta comer. A mi hermano, que, aunque pocas veces lo diga directamente, sé que presume de su hermana ante sus amigos —“es como una hacker”. Y a mi tita Rosa, porque gracias a aquellos veranos en Santander llenos de cariño, nació en mí un amor profundo por el mar y la costa. Gracias a nuestra tradición de ir cada mañana a la Virgen del Mar, lloviera o hiciera sol, mi vínculo con el océano no ha hecho más que crecer con los años.

Además, no podía faltar en estos agradecimientos mi abuelo, que desde el cielo sé que me acompaña y sigue con orgullo cada uno de mis pasos. De él heredé una curiosidad insaciable que solo él sabía alimentar. Cada mañana de verano en aquella playa se convertía en una nueva aventura: explorando juntos los recovecos más vírgenes entre las rocas, escudriñando hasta el último rincón, mientras sus historias e infaltables datos sobre nuestras observaciones daban alas a mi imaginación. Gracias,

abuelo, por tener siempre una respuesta para aquella niña que tras cada explicación sólo podía preguntarte otra vez: “¿Y por qué?”.

Mi gratitud se extiende a toda mi familia, y de manera muy especial a mi prima Gabriela. Han sido un pilar constante a mi lado en cada momento de necesidad —y no han sido pocos. Sería deshonesto negar que las lágrimas han brotado en más de una cena familiar, pues siempre me han ofrecido su incondicional apoyo, incluso antes de que supiera cómo pedirlo.

Mis amigas también son parte fundamental en este recorrido, que son las que siempre han estado ahí para sacarme de casa, aunque solo sea por unos minutos, para compartir risas que liberan mi mente y alejan la ansiedad y las preocupaciones. Estoy profundamente agradecida por tener siempre un colchón donde caer, un refugio donde descansar y recargar energías. Gracias, no sé qué haría sin vosotras.

Por supuesto, ninguna palabra es suficiente para expresar mi gratitud a mi pareja. Es quien realmente soporta mi lado más irracional, y valoro inmensamente cada ocasión en la que ha escuchado mis explicaciones sobre temas que, a menudo, ni le interesan ni llega a comprender del todo. Ha sido el testigo paciente de mis ensayos, ha celebrado cada una de mis victorias y ha llorado a mi lado en mis derrotas. Ha sabido cómo animarme incluso en los momentos en los que yo misma no sabía que lo necesitaba. Me ha cuidado y, con una mirada llena de orgullo, siempre ha observado mis gráficos o mi código, como un padre que cuelga el garabato de su hijo en la nevera. Gracias, Andy, por darme todo aquello de lo que yo no soy capaz.

Y, por último, quiero agradecer a mi tutor, Leo. Gracias por brindarme la oportunidad de realizar este TFG que sin duda ha sido la experiencia más enriquecedora de mi carrera. Gracias por proponer este proyecto y por elegirme para llevarlo a cabo. Aunque, como cualquier trabajo, ha estado lleno de dificultades que me han puesto a prueba, he disfrutado profundamente cada momento invertido en este proyecto. Me impresiona cómo ha sido tan divertido y a la vez tan frustrante, aprender un poquito de programación desde prácticamente cero.

También quiero agradecerte por toda la ayuda que me has brindado a lo largo del proceso. Me has guiado, me has enseñado innumerables cosas nuevas y fascinantes, y siempre has estado allí cuando lo he necesitado. Gracias, además, por tus valiosos consejos, y, sobre todo, por tu pasión. Es evidente que te encanta lo que haces, te entusiasma compartir lo que sabes, y tu energía y dedicación han dejado una huella imborrable en mí.

Índice

Abstract	0
Resumen divulgativo	0
Identificación de los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS).....	0
1. Introducción	1
1.1. Contexto y motivación del estudio.....	1
1.2. Objetivos.....	2
2. Marco teórico	3
2.1. Técnica de análisis de masas de agua.....	3
2.1.1. Concepto de <i>endmember</i>	3
2.1.2. El método OMPA (<i>Optimum Multiparameter Analysis</i>)	4
2.1.3. Estimación de incertidumbre con el método de Monte Carlo.....	6
2.2. Campaña oceanográfica TRANSMOW	8
2.2.1. Objetivos científicos.....	8
2.2.2. Datos y técnicas de muestreo.....	9
2.3. Oceanografía de la zona de estudio.....	10
2.3.1 Capa superior ($\gamma < 27.10 \text{ kg/m}^3$).....	11
2.3.2 Capa intermedia ($27.10 \leq \gamma < 27.90 \text{ kg/m}^3$).....	13
2.3.3 Capa profunda ($27.90 \leq \gamma < 28.10 \text{ kg/m}^3$).....	14
3. Metodología.....	16
3.1 Diseño y estructura de la herramienta computacional	16
3.1.1 Importación y configuración de datos.....	16
3.1.2 Generación de <i>endmembers</i> aleatorios	16
3.1.3 Estandarización de matrices.....	17
3.1.4 Ponderación paramétrica.....	17
3.1.5 Resolución del sistema OMPA.....	18
3.1.6 Implementación de Monte Carlo.....	19
4. Aplicación a los datos de TRANSMOW	20
4.1. Definición de <i>endmembers</i> para la zona de estudio.....	20
4.2. Definición de parámetros iniciales.....	21
4.3 Resultados obtenidos	22
4.3.1 Distribución espacial de masas de agua	22
4.3.2 Evaluación de la incertidumbre.....	24
5. Discusión de resultados.....	26
5.1 Comparación con estudios previos	26

5.2 Limitaciones del método y posibles fuentes de error	29
6. Conclusiones	30
7. Bibliografía	31

Abstract

Accurate estimation of water mass mixing is essential for understanding ocean dynamics and its influence on climate. One of the most widely used techniques for this purpose is Optimum Multiparameter Analysis (OMPA), which calculates the relative proportions of different water masses based on conservative physico-chemical properties. However, the classical formulation of OMPA assumes fixed values for each water mass (*endmember*), overlooking their natural variability, which can compromise the reliability of the results.

This Bachelor's Thesis presents a computational tool developed in Python that improves the classical OMPA approach by integrating it with Monte Carlo simulations. This method generates thousands of endmember combinations within the natural variability ranges of the water masses. Additionally, it weights each tracer according to its total uncertainty (both analytical and structural), providing probability distributions instead of a single deterministic solution.

This methodological framework was applied to data from the TRANSMOW oceanographic campaign (2021), focused on the study of North Atlantic water masses adjacent to the Iberian margin. Four conservative tracers (salinity, potential temperature, dissolved oxygen, and spiciness) were used to estimate the contribution of five main water masses: ENACW16, ENACW12, MW, LSW, and NEADWu. The results revealed areas with high dispersion in the estimated fractions, particularly for Labrador Sea Water (LSW), indicating low reliability and potential limitations in the representativeness of the endmembers—diagnostics that are not possible with traditional OMPA.

Overall, the tool represents a relevant methodological advance, offering more robust estimates and an objective evaluation of their reliability, with broad potential applications in oceanographic studies.

Keywords:

Water mass mixing, Optimum Multiparameter Analysis (OMPA), Monte Carlo method, statistical uncertainty, endmembers, chemical oceanography, computational tool, TRANSMOW campaign, tracers, Atlantic Iberian margin.

Resumen

La estimación precisa de la mezcla de masas de agua es fundamental para comprender la dinámica oceánica y su influencia en el clima. Una de las técnicas más utilizadas con este fin es el Análisis Óptimo Multiparamétrico (OMPA), que calcula las proporciones relativas de distintas masas de agua a partir de propiedades físico-químicas conservativas. No obstante, su formulación clásica asume valores fijos para cada masa de agua (*endmember*), ignorando su variabilidad natural, lo que puede comprometer la fiabilidad de los resultados.

Esta Tesis de Grado presenta una herramienta computacional desarrollada en Python que mejora el enfoque clásico de OMPA mediante la integración con simulaciones de Monte Carlo. Este método permite generar miles de combinaciones de *endmembers* dentro de rangos naturales de las masas de agua. Además, pondera cada trazador según su incertidumbre total (analítica y estructural), proporcionando distribuciones de probabilidad en lugar de una única solución determinista.

La herramienta se aplicó a datos de la campaña oceanográfica TRANSMOW (2021), centrada en el estudio de masas de agua del Atlántico Norte adyacentes al margen ibérico. Se emplearon cuatro trazadores conservativos (salinidad, temperatura potencial, oxígeno disuelto y spiciness) para estimar la contribución de cinco masas de agua: ENACW16, ENACW12, MW, LSW y NEADWu. Los resultados revelaron zonas con alta dispersión en las fracciones estimadas, especialmente para el Agua del Mar del Labrador (LSW), lo que indica baja fiabilidad y posibles deficiencias en la definición de los *endmembers*, aspectos no detectables con OMPA tradicional.

En conjunto, la herramienta representa un avance metodológico relevante, ofreciendo estimaciones más robustas y una evaluación objetiva de su confiabilidad, con amplio potencial de aplicación en estudios oceanográficos.

Palabras clave:

Mezcla de masas de agua, análisis multiparamétrico óptimo (OMPA), método de Monte Carlo, incertidumbre estadística, *endmembers*, oceanografía química, herramienta computacional, campaña TRANSMOW, trazadores, margen Ibérico atlántico.

Resumen divulgativo

¿Cómo se mezclan las aguas del océano y cómo se estudian?

El océano no es un volumen de agua homogéneo: está compuesto por diferentes “masas de agua” que tienen propiedades características como temperatura, salinidad, oxígeno o nutrientes. Estas masas se forman en diferentes regiones del planeta con diferentes densidades y estas diferencias permiten su movimiento a través del océano durante décadas o incluso siglos. Al encontrarse, se mezclan entre sí, generando una compleja estructura que influye en el clima mediante la redistribución de energía, sales y nutrientes. Conocer cómo se mezclan estas aguas nos ayuda a entender mejor cómo funciona el océano, sus ecosistemas, cómo transporta calor y carbono, y cómo responde al cambio climático.

Para estudiar esa mezcla, los oceanógrafos utilizan diversas técnicas que permiten estimar qué proporción de cada “tipo de masa de agua” hay en una muestra del océano. Una de las más utilizadas es un método conocido como Análisis Multiparamétrico Óptimo (OMPA). Este método compara las propiedades del agua de una muestra con las características “típicas” de distintas masas de agua, y calcula qué combinación de ellas explica mejor lo que se ha medido. Sin embargo, esas características típicas no son siempre iguales: cambian con el tiempo y el lugar, pero el OMPA solo puede utilizar una única combinación de propiedades. Esto puede afectar a los resultados del análisis y llevar a conclusiones poco fiables si no se tiene en cuenta correctamente.

¿Qué se ha hecho en este trabajo?

Para superar las limitaciones del método clásico, este trabajo presenta una herramienta informática que combina el enfoque OMPA con una técnica estadística conocida como simulación de Monte Carlo. Este método consiste en realizar miles de repeticiones, introduciendo pequeñas variaciones en los datos de entrada, para observar cómo influyen en los resultados. En lugar de asignar un único valor fijo a cada propiedad característica de las masas de agua —algo que normalmente debe decidir el propio oceanógrafo—, el modelo genera valores aleatorios dentro de los rangos naturales conocidos para cada masa. Así, se representa de forma más realista la variabilidad del océano y se reduce la subjetividad en la selección de parámetros.

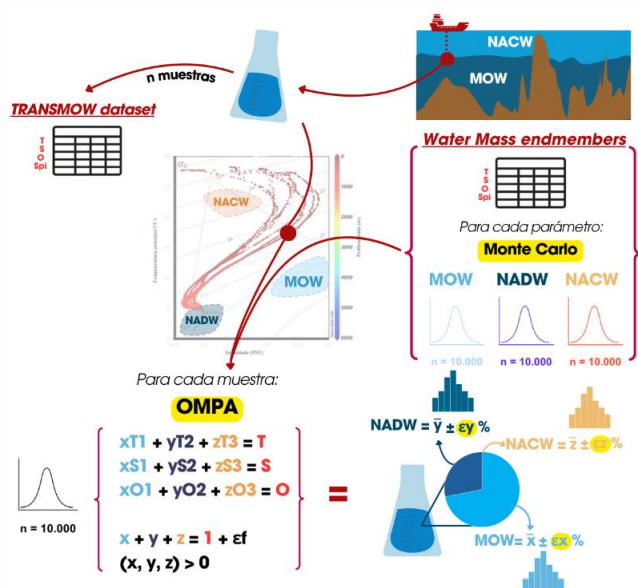


Figura A. Representación conceptual de la herramienta computacional OMPA - Monte Carlo: Después de 10,000 simulaciones, hay el mismo número de soluciones potenciales de OMPA para las fracciones de masa de agua para cada muestra. Se pueden obtener las fracciones promedio de OMPA y la desviación estándar de OMPA para cada masa de agua.

Para probar su funcionamiento, se utilizó información recogida durante la campaña oceanográfica TRANSMOW (2021), llevada a cabo en el océano Atlántico, alrededor de la Península Ibérica. La herramienta analizó cuatro propiedades clave del agua (salinidad, temperatura, oxígeno disuelto y spiciness, una variable útil para distinguir masas de agua con densidades similares), con el objetivo de calcular la proporción de cinco tipos principales de agua en cada muestra: dos variantes de agua atlántica central (ENACW12 y ENACW16), agua mediterránea (MW), agua del mar de Labrador (LSW) y una masa profunda del Atlántico (NEADWu).

¿Qué se ha descubierto?

En algunas zonas, los resultados mostraron una gran variabilidad: pequeñas diferencias en los datos de entrada daban lugar a estimaciones muy distintas. Un caso llamativo fue el del agua del mar de Labrador (LSW), cuyas proporciones calculadas cambiaban mucho entre simulaciones. Esto sugiere que los valores de referencia utilizados para definir esta masa de agua podrían no ser de todo representativos.

Este tipo de “señales de alerta” son especialmente útiles, ya que con el método tradicional no se detectan. El enfoque clásico ofrece una única respuesta, sin información sobre su nivel de confianza. En cambio, la herramienta desarrollada no solo estima las proporciones de cada masa de agua, sino que también muestra qué tan fiables son esas estimaciones. Así, permite identificar posibles errores y saber cuándo los resultados deben interpretarse con precaución.

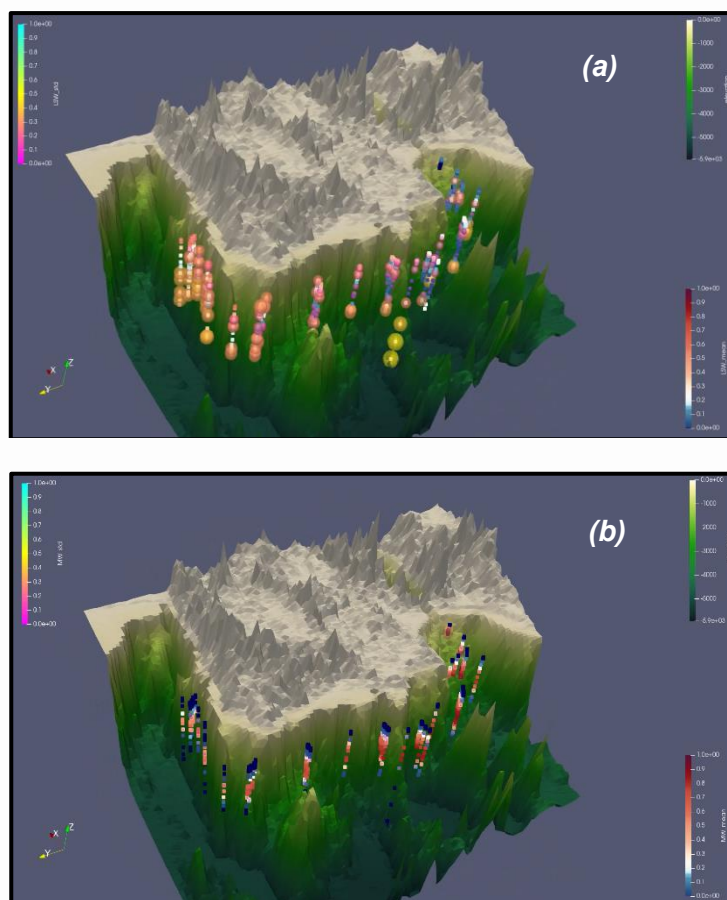


Figura B. Proporción relativa de (a) Agua del Mar de Labrador (LSW) y (b) Agua Mediterránea (MW) en las mezclas a lo largo del margen Atlántico Ibérico. Esta figura 3D representa la distribución de la proporción relativa de cada masa de agua. Los puntos muestran la ubicación de las estaciones de muestreo y su color indica la abundancia relativa de la masa de agua correspondiente según la escala de colores, que va del azul (bajo porcentaje de contribución) al rojo (alto porcentaje de contribución). El tamaño de las esferas que rodean cada punto representa la fiabilidad del resultado, siendo esferas pequeñas indicativas de una alta fiabilidad y esferas grandes de una alta incertidumbre. Para la LSW (a), se observa que las zonas con altos porcentajes de contribución muestran una mayor incertidumbre (esferas más grandes) que para la MW (b) (esferas pequeñas). La batimetría del fondo marino también es visible en la figura (GEBCO Compilation Group. (2024). GEBCO 2024 Grid.

<https://doi.org/10.5285/1c44ce99-0a0d-5f4f-e063-7086abc0ea0f>.

Representación realizada con Paraview (Kitware, Inc. (2023). ParaView (Versión 5.11.0) [Software]:

<https://www.paraview.org/>.

Material suplementario en formato de vídeo disponible en la siguiente carpeta: https://drive.google.com/drive/folders/1L_yJDqEfo40hvYfShnldOlfGvmKpG1mG?usp=sharing.

Identificación de los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS)



Este Trabajo de Fin de Grado contribuye de manera indirecta al Objetivo de Desarrollo Sostenible (ODS) 14: Vida submarina, cuyo propósito es conservar y utilizar sosteniblemente los océanos, los mares y los recursos marinos. El análisis de las masas de agua y sus procesos de mezcla permite comprender la dinámica oceánica y evaluar cómo afecta al transporte de calor, carbono y nutrientes, aspectos clave en la resiliencia del océano frente al cambio climático.

En particular, el TFG se alinea con la meta 14.A, que promueve el aumento del conocimiento científico y la transferencia de tecnología marina. El desarrollo de una herramienta computacional abierta, basada en técnicas reproducibles y con potencial de aplicación en otras campañas, representa una aportación concreta a la mejora de las capacidades científicas en oceanografía física.

Además, el trabajo tiene relación con el ODS 13: Acción por el clima, al mejorar la comprensión de los mecanismos de circulación y mezcla de masas de agua, fundamentales para modelar el papel del océano en la regulación climática global. Dentro de este objetivo, se destaca la meta 13.3, centrada en mejorar la educación, la sensibilización y la capacidad humana e institucional sobre la mitigación y adaptación al cambio climático, que se ve reforzada por el carácter formativo y divulgativo del TFG.

El uso de datos reales de campañas científicas y el tratamiento riguroso de la incertidumbre aportan evidencia útil para la toma de decisiones basada en ciencia (relacionada con la meta 14.2), apoyando la gestión sostenible de los ecosistemas marinos y sus servicios asociados.

En conclusión, este trabajo, desde una perspectiva científica y tecnológica, refuerza el papel del conocimiento como herramienta para alcanzar los ODS relacionados con la protección del medio marino y la lucha contra el cambio climático.



1. Introducción

1.1. Contexto y motivación del estudio

El océano desempeña un papel crucial en la regulación del sistema climático global, actuando como un moderador térmico, un sumidero de carbono y un eje fundamental del transporte de calor y masa a escala planetaria (Haine & Hall, 2002; Lear et al., 2003). En particular, la Circulación Meridional de Retorno del Atlántico (AMOC, por sus siglas en inglés) es un componente esencial del sistema de circulación termohalina, y su posible debilitamiento o colapso representa uno de los principales puntos de inflexión climáticos identificados por el IPCC y diversos estudios recientes (Caesar et al., 2021; IPCC, 2023; Rahmstorf et al., 2015).

En este contexto, el estudio de las masas de agua oceánicas constituye una herramienta indispensable para caracterizar la dinámica oceánica. Las propiedades físico-químicas del agua —como la temperatura, salinidad, oxígeno disuelto, nutrientes y pH— permiten identificar estructuras hidrodinámicas, procesos de mezcla y transporte, además de ser indicadores sensibles de cambios ambientales a distintas escalas temporales y espaciales (Liu & Tanhua, 2021). Estas propiedades permiten rastrear la historia y evaluar la variabilidad asociada a cambios naturales y/o forzados (antrópicos) del sistema oceánico (Groeskamp et al., 2019).

El análisis detallado de los procesos de mezcla entre masas de agua en el océano profundo requiere, no sólo una comprensión general de la oceanografía de la zona a estudiar, sino también, la implementación de herramientas cuantitativas avanzadas (Haine & Hall, 2002; Tomczak, 1999). Una de las metodologías de cálculo más empleadas en oceanografía es el Análisis Multiparamétrico Óptimo (OMPA, por sus siglas en inglés Optimum Multiparameter Analysis). El uso de herramientas computacionales de tipo OMPA se ha consolidado como una metodología efectiva en oceanografía, ya que permite estimar la contribución relativa de diferentes masas de agua a partir de las propiedades físico-químicas conservativas características de cada masa de agua (García-Lafuente et al., 2006; Glover et al., 2011; Jenkins et al., 2015; Tomczak & Large, 1989).

El método OMPA parametriza las mezclas de las diferentes masas de agua como combinaciones convexas¹ de "*endmembers*", es decir, "masas de agua tipo", generalmente definidas por un conjunto característico ideal de propiedades físico-químicas (temperatura, salinidad, etc) en su área geográfica de formación (Tomczak & Large, 1989). No obstante, la elección adecuada de estos *endmembers* es crítica, ya que cualquier sesgo y/o desviación en la selección de las propiedades "tipo" puede afectar significativamente la estimación de las fracciones de mezcla y, por consiguiente, la interpretación de los procesos oceanográficos involucrados (Buil et al., 2025; Roshan & Wu, 2015).

Es un hecho constatado que las masas de agua pueden presentar una variabilidad natural de propiedades físico-químicas en las áreas de formación, tanto en el espacio como en el tiempo (Groeskamp et al., 2019). Esta variabilidad natural observada en las propiedades de los *endmembers* puede ser consecuencia de factores como la estacionalidad, las interacciones con otros procesos regionales (aportes de agua dulce, cambios en las tasas de evaporación, calentamiento superficial, etc) (Tomczak,

1 Donde todos los coeficientes son no negativos y suman 1.

1999). Una consecuencia directa de esta variabilidad natural es que, los *endmembers* no pueden definirse mediante un único valor puntual, sino que deben representar un rango plausible de valores con una incertidumbre asociada. Esta variabilidad de los *endmembers* no ha sido tradicionalmente bien representada en estudios previos utilizando herramientas OMPA (García-Ibáñez et al., 2018; Jenkins et al., 2015; Tomczak, 1999), lo cual tiene como resultado una subestimación de la incertidumbre en los procesos de mezcla estudiados en cada caso (Buil et al., 2025).

Este Trabajo de Fin de Grado se adentra directamente en esta problemática y propone el desarrollo de una herramienta computacional que combine el método OMPA con simulaciones de la incertidumbre asociada a los *endmembers* utilizando métodos de Monte Carlo. La integración de estas metodologías permite reducir la componente subjetiva en la selección de los valores de los *endmembers*, considerando explícitamente y de forma totalmente cuantitativa la variabilidad natural de las masas de agua, permitiendo así una modelización más realista de los procesos de mezcla a la vez que se obtienen información sobre la fiabilidad estadística del modelo empleado.

El método de Monte Carlo, ampliamente utilizado en ciencias físicas y computacionales, posibilita la generación de un conjunto de escenarios posibles mediante simulaciones pseudo-aleatorias, proporcionando una base estadística sólida para evaluar la incertidumbre en los resultados (Harrison et al., 2010). Aplicado al análisis de mezclas de masas de agua, este enfoque permite explorar múltiples combinaciones de *endmembers* dentro de sus rangos característicos, mejorando la robustez y la validez de las estimaciones obtenidas mediante OMPA.

Finalmente, la herramienta computacional desarrollada será evaluada en el marco de la campaña oceanográfica TRANSMOW, utilizando para ello los datos hidrográficos recogidos a lo largo de la vertiente Atlántica del margen Ibérico. Esta última etapa de validación permitirá comprobar la eficiencia y fiabilidad de esta nueva herramienta computacional en la estimación de las fracciones de mezcla de masas de agua, a partir de los datos fisicoquímicos obtenidos durante la campaña. Los resultados serán representados mediante secciones hidrográficas en el software Ocean Data View (ODV) (Schlitzer, 2023) y comparados con estudios previos, lo que permitirá evaluar la concordancia y robustez de las estimaciones, así como validar la capacidad de la herramienta para mejorar resultados previos.

1.2. Objetivos

Este Trabajo de Final de Grado presenta dos objetivos claramente diferenciados:

- 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).

2. Marco teórico

2.1. Técnica de análisis de masas de agua

2.1.1. Concepto de *endmember*

Las propiedades físico-químicas del agua de mar se determinan, en gran medida, en la superficie oceánica o en sus proximidades, como resultado de procesos como la dilución/evaporación, el intercambio de calor y gases con la atmósfera y la actividad biológica (Emery, 2001). Una vez establecidas estas características, el agua puede ser transportada hacia el interior del océano a través de mecanismos como el hundimiento por densificación (convección profunda) o la subducción debida a la convergencia por forzamientos atmosféricos (Haine & Hall, 2002). Durante su trayecto, estas masas de agua continúan modificándose, ya sea mediante mezcla advectiva o a través de reacciones biogeoquímicas in situ (respiración), lo que genera una gran complejidad en su caracterización (Glover et al., 2011).

Para interpretar adecuadamente estos procesos, se recurre al análisis de mezclas masas de agua, cuyo objetivo es identificar los orígenes y combinaciones de agua presentes en una determinada región del océano (Groeskamp et al., 2019). Este enfoque se basa en dos conceptos fundamentales. El primero es el de “**masas de agua tipo**”, definida como un conjunto de valores extremos característicos o **endmembers** de las propiedades físico-químicas conservativas o cuasi-conservativas en su región de formación. Idealmente, un *endmember* representa una combinación única e idealizada de dichas propiedades (Glover et al., 2011).

El segundo concepto es el de “**masa de agua**”, entendido como un rango de propiedades observadas en el interior del océano que refleja una mezcla variable entre distintos tipos de agua fuente. La caracterización de estas masas permite reconstruir la historia de formación, transporte y transformación de las aguas oceánicas, y resulta esencial para el estudio de la dinámica y la estructura del océano (Glover et al., 2011). Desde esta perspectiva, una descripción exhaustiva de una masa de agua requeriría, en teoría, un número infinito de tipos de agua fuente. Sin embargo, hay muchas situaciones en las que un número finito (y reducido) de tipos de agua es suficiente para representar completamente una masa de agua. (Tomczak & Large, 1989).

Las propiedades físico-químicas medidas en muestras de agua se pueden clasificar como propiedades conservativas (trazadores) y propiedades no conservativas (cuasi-conservativas). Las propiedades conservativas como la salinidad y la temperatura potencial son modificadas exclusivamente por procesos de advección y mezcla con otras masas de agua (Tomczak 1999). En cambio, las propiedades no conservativas, como el oxígeno disuelto o los nutrientes, pueden modificarse tanto por procesos de mezcla como por procesos biogeoquímicos locales, lo que limita parcialmente su utilidad para análisis de mezcla (Glover et al., 2011).

Los trazadores conservativos permiten representar los procesos de mezcla como una combinación lineal proporcional de estos parámetros, estableciendo una “línea de mezcla” (Poole & Tomczak, 1999). Por ejemplo, en un diagrama de temperatura frente a salinidad (diagrama TS), dos *endmembers* aparecen representados como los puntos extremos y las potenciales mezclas entre estos *endmembers* se distribuyen sobre una línea recta que los conecta. En casos más complejos, donde intervienen tres *endmembers*, las muestras resultantes de la mezcla ocupan posiciones dentro de un

triángulo definido por los vértices correspondientes, permitiendo describir cada punto como una combinación fraccional de los tipos de agua extremos cuya suma debe ser igual a uno (bajo la asunción de conservatividad) (**Fig. 1a**). Este principio puede extenderse a un espacio multidimensional (N *endmembers*) donde cada trazador define un eje (**Fig. 1b**). En este espacio, cada *endmember* ocupa una posición fija, y las muestras resultantes de la mezcla se ubican en posiciones intermedias dentro del poliedro formado por los *endmembers* seleccionados (**Fig. 1b**).

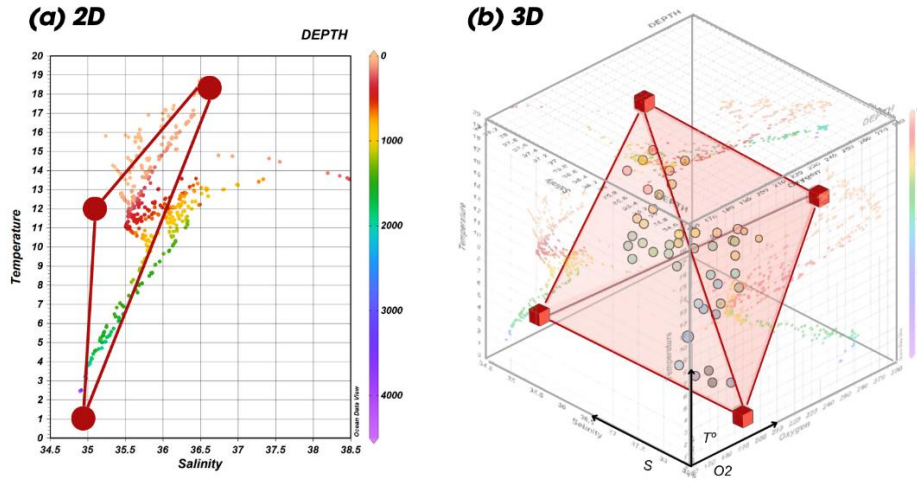


Figura 1. Representación conceptual geométrica de *endmembers* (puntos rojos) y muestras de agua (puntos/esferas coloreadas) en espacios bidimensional (a) y tridimensional (b) definidos por variables trazadoras. El polígono (2D) y el tetraedro (3D) delimitan el espacio de mezcla teórica.

2.1.2. El método OMPA (Optimum Multiparameter Analysis)

El Análisis Multiparamétrico Óptimo (**OMPA**, por sus siglas en inglés Optimum Multiparameter Analysis) es una técnica cuantitativa utilizada en oceanografía para estimar la contribución relativa de distintos *endmembers* a una muestra oceánica cuyas propiedades físico-químicas son resultantes de los procesos de mezcla entre esos *endmembers*. Este método permite caracterizar procesos de mezcla complejos mediante sistemas de ecuaciones lineales con diversas restricciones físicas (Tomczak & Large, 1989).

El principio fundamental del OMPA parte de la suposición de que cualquier parcela de agua puede describirse como una mezcla lineal de M *endmembers*, siempre que se disponga de al menos $M - 1$ trazadores conservativos (Jenkins et al., 2015; Poole & Tomczak, 1999). La naturaleza "subdeterminada" del sistema de ecuaciones que describe esta mezcla hace necesaria la introducción de una restricción adicional: la suma de las fracciones de *endmembers* debe ser estrictamente igual a la unidad, o, en otras palabras, principio de conservatividad. Asimismo, se exige la condición de no negatividad para dichas fracciones, limitándolas al intervalo $[0, 1]$, lo cual garantiza la coherencia física al impedir contribuciones negativas de cualquier tipo de agua (García-Ibáñez et al., 2018; Glover et al., 2011).

Para ilustrar esto, consideremos una muestra compuesta por tres tipos de agua (x_1, x_2, x_3) y dos propiedades conservativas, como la temperatura (T) y la salinidad (S). Si T_1, T_2, T_3 y S_1, S_2, S_3 representan los valores característicos de los tres *endmembers*, el sistema se puede escribir como:

$$\begin{aligned} x_1 T_1 + x_2 T_2 + x_3 T_3 &= T \\ x_1 S_1 + x_2 S_2 + x_3 S_3 &= S \\ x_1 + x_2 + x_3 &= 1 \end{aligned} \quad (1)$$

Utilizando álgebra lineal, este sistema de ecuaciones puede describirse a nivel matricial, pudiendo expresarse de forma más general como:

$$Ax = b \quad (2)$$

donde **A** es la matriz de diseño que contiene los valores de T y S característicos de los *endmembers*, **x** es el vector de fracciones (incógnitas), y **b** representa las propiedades medidas (T y S) en una parcela de agua determinada. La resolución del sistema busca encontrar el vector **x** que minimiza el error entre la muestra observada y su reconstrucción como combinación lineal de *endmembers*, bajo las restricciones mencionadas:

$$\sum x_i = 1, 0 \leq x_i \leq 1 \quad (3)$$

Dado que los distintos trazadores presentan unidades diferentes (°C para temperatura y g/kg para salinidad) y estas propiedades son generalmente medidas en el campo con diferentes niveles de precisión analítica, es fundamental estandarizar y ponderar las ecuaciones antes de resolver el sistema. La estandarización asegura que ningún parámetro domine el ajuste simplemente por tener valores numéricos más grandes, mientras que la ponderación tiene como objetivo asignar un peso relativo a cada trazador en función de su fiabilidad. Para ello, cada propiedad se normaliza en función de su rango natural y de su incertidumbre efectiva, que integra tanto los errores analíticos como la variabilidad observada en los *endmembers*. Esta información se incorpora mediante una matriz de pesos (**W**) o matriz de ponderación, lo que garantiza que los trazadores más precisos y representativos tengan mayor influencia en el ajuste final, mejorando así la robustez y la confiabilidad de las soluciones obtenidas (Glover et al., 2011; Pardo et al., 2012).

Específicamente en este trabajo, los valores de la matriz de ponderación están dados por la ecuación:

$$W_{ii} = \delta_i / \sigma_i \quad (4)$$

Donde δ_i es el rango de variación del trazador *i* (es decir, el rango de variación máximo del trazador *i* entre los tipos de agua fuente) y σ_i es la incertidumbre efectiva asociada con ese trazador. La "**incertidumbre efectiva**" combina tanto la incertidumbre analítica del instrumento de medición como la incertidumbre asociada a la variabilidad de los tipos de agua *endmember*, proporcionando una medida integral de la fiabilidad de los datos (Poole & Tomczak, 1999).

Adicionalmente, esta ponderación se extiende a la restricción de conservación de masa, correspondiente a la ecuación adicional incluida en la matriz de *endmembers*. El peso asociado a esta condición define el grado de tolerancia permitido en la discrepancia con respecto a la suma unitaria. Así, si se admite una mayor incertidumbre en esta restricción (por ejemplo, un 10 %), se utilizará un peso menor, como 10; en cambio, si se requiere mayor rigidez (por ejemplo, una discrepancia menor al 1 %), se aplicará un peso más alto, como 100. En ciertos casos, se opta por ponderar esta ecuación con el mismo nivel de exigencia que para trazadores de alta precisión como la temperatura (Poole & Tomczak, 1999).

Con estos ajustes, podemos retomar la formulación original (2) con la matriz de diseño y de datos ya estandarizadas y ponderadas (A). Así obtenemos el vector $Ax-b$, es decir, la diferencia entre las propiedades calculadas (Ax) y las propiedades medidas (b). Minimizar este vector (en realidad, minimizar la función de la suma de los residuos al cuadrado relacionada con este vector) es el objetivo del análisis OMPA para encontrar la mejor estimación de las proporciones de los tipos de agua en una muestra:

$$\text{minimizar } \|A \cdot x - b\|^2 \text{ tal que } x_i \geq 0 \text{ para todo } i \quad (5)$$

Este problema se conoce como “mínimos cuadrados no negativos” (Non-Negative Least Squares, NNLS), ya que además de minimizar el error, se impone la restricción de que los valores de x , que representan las proporciones de cada masa de agua, deben ser no negativos para que tengan sentido físico (Glover et al., 2011).

Para encontrar específicamente x , se utiliza un algoritmo numérico diseñado para resolver este tipo de problemas NNLS. La razón por la que se emplea un algoritmo es que la restricción de no negatividad impide resolver el sistema mediante métodos algebraicos directos convencionales (como la inversión de matrices), ya que estos no garantizan que las soluciones sean físicamente válidas (no negativas). Por ello, el algoritmo introduce un proceso iterativo ajustando los valores de x hasta que la combinación lineal Ax se aproxima lo mejor posible a los datos observados b , sin que ninguna fracción sea negativa (Björk, 1976). El resultado es un conjunto de coeficientes óptimos que representan la contribución relativa de cada *endmember* en la muestra.

De este modo, cualquier muestra que se encuentre dentro del espacio definido por los *endmembers* en un espacio multidimensional (**Fig. 2**) puede describirse como una combinación ponderada válida de esas masas de agua (Glover et al., 2011).

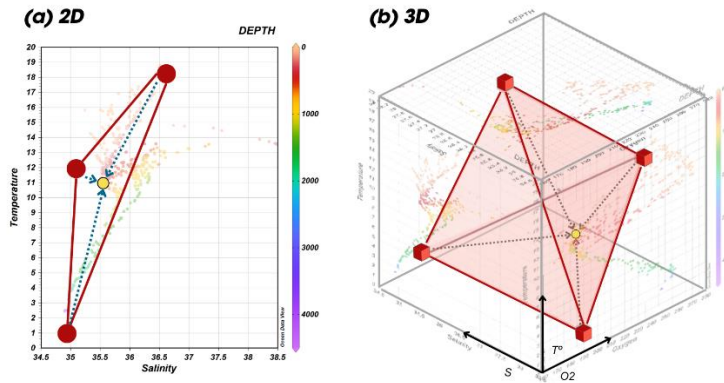


Figura 2. Representación conceptual geométrica del Análisis Multiparamétrico Óptimo (OMPA) tradicional. Se ilustra la descomposición de una muestra (punto amarillo) como una mezcla lineal de *endmembers* (puntos rojos) en espacios bidimensional (a) y tridimensional (b), permitiendo cuantificar su proporción relativa mediante la resolución de un sistema de ecuaciones por mínimos cuadrados con restricciones (flechas azules discontinuas).

2.1.3. Estimación de incertidumbre con el método de Monte Carlo

La estimación de incertidumbre es un componente esencial en cualquier análisis cuantitativo en oceanografía (Iskandarani et al., 2016). En el contexto del análisis OMPA, una de las principales limitaciones es el grado de subjetividad implicado en la

selección de los *endmembers*, así como en las decisiones relacionadas con el peso asignado a cada trazador y los valores representativos de cada masa de agua (De Brauwere et al., 2007). En este trabajo abordamos este problema de forma directa utilizando un método de Monte Carlo acoplado al análisis OMPA, una técnica probabilística que permite cuantificar la sensibilidad de las soluciones del OMPA frente a pequeñas perturbaciones en los parámetros de entrada.

El método **Monte Carlo** se basa en la generación de un número elevado de simulaciones aleatorias en las cuales se varían sistemáticamente ciertos parámetros del modelo dentro de rangos previamente definidos. Estas variaciones no son arbitrarias, sino que se realizan siguiendo distribuciones estadísticas (como la distribución normal o distribución uniforme), que reflejan el conocimiento que se tiene sobre la incertidumbre inherente a los datos de entrada. El resultado no es una única solución, sino un conjunto de soluciones que permite construir una distribución de probabilidad para cada variable de salida, ofreciendo así una representación más realista y estadísticamente significativa del sistema estudiado (Harrison et al., 2010).

En el caso del OMPA, la aplicación del Monte Carlo permite pasar de una única solución determinista a una aproximación probabilística que refleja la variabilidad de los tipos de masa de agua que participan en la mezcla. En esta, cada simulación utiliza una matriz de *endmembers* distinta, generada a partir de perturbaciones aleatorias dentro de sus rangos de incertidumbre para cada trazador. Además, para cada iteración cambian los pesos asignados a cada parámetro, lo que implica que en cada realización se define un nuevo poliedro dentro del espacio de mezcla (**Fig. 3**). Cada uno de estos poliedros representa un sistema potencialmente diferente, con el que se resuelven las fracciones de masas de agua para cada muestra, produciendo así una nueva solución.

A partir de este conjunto de resultados, es posible caracterizar estadísticamente las soluciones del OMPA. Por ejemplo, se puede calcular el valor medio o mediano de la fracción de cada *endmember* en cada muestra, estimar intervalos de confianza (percentiles), evaluar la dispersión mediante la desviación estándar y detectar posibles soluciones extremas o no físicas.

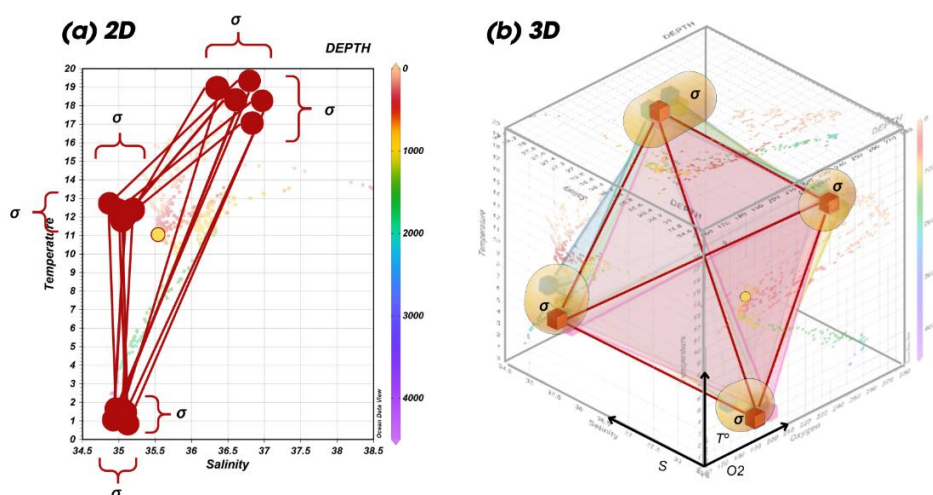


Figura 3. Representación geométrica conceptual de la implementación del método de Monte Carlo en el análisis OMPA. En cada simulación, se generan combinaciones aleatorias de *endmembers* dentro de sus rangos de variabilidad característicos (σ), dando lugar a múltiples triángulos de mezcla en el espacio bidimensional (a) y a distintos poliedros en el espacio tridimensional (b). Esta dispersión de los *endmembers* define una nube de puntos en el espacio N-dimensional de los trazadores (representada por la esfera amarilla en (b)), dentro de la cual se selecciona aleatoriamente un conjunto de *endmembers* para cada simulación. A partir de estos, se construye un nuevo poliedro, en cuyo interior se evalúa la composición de cada muestra (punto amarillo) durante cada iteración de Monte Carlo.

La incorporación del método Monte Carlo al análisis OMPA ofrece varias ventajas fundamentales:

- En primer lugar, permite **reducir la subjetividad del procedimiento**, al reemplazar elecciones puntuales por un espectro de posibilidades realistas, basadas en incertidumbres bien fundamentadas.
- En segundo lugar, proporciona una **cuantificación explícita de la incertidumbre asociada a cada solución**, lo cual es crucial para interpretar con rigor los resultados.
- El **enfoque estadístico aporta robustez** al análisis, permitiendo identificar aquellas soluciones que se repiten consistentemente a lo largo de múltiples simulaciones y, por tanto, pueden considerarse más confiables.
- Por último, este enfoque facilita una **visualización más realista del sistema oceánico**, al capturar su variabilidad natural y los rangos plausibles de mezcla entre masas de agua.

2.2. Campaña oceanográfica TRANSMOW

2.2.1. Objetivos científicos

La campaña oceanográfica **TRANSMOW** se llevó a cabo entre el 28 de abril y el 16 de mayo de 2021, a bordo del BIO Hespérides. Durante 18 días, la expedición bordeó la península ibérica desde el puerto de Barcelona hasta Gijón. Su propósito principal fue caracterizar las propiedades físico-químicas y geoquímicas de la *Mediterranean Outflow Waters* (MOW). La campaña fue liderada por la Universidad de Barcelona (UB), en colaboración con el Instituto de Ciencias del Mar (ICM-CSIC), el Centro de Ciencias do Mar (CCMAR-IPMA, Portugal) y la Royal Holloway University of London (Reino Unido), (Pena et al., 2025).

Durante la campaña se obtuvieron perfiles de CTD de la columna de agua, muestras de sedimento superficial y testigos sedimentarios largos en diversos puntos estratégicos alrededor de la Península Ibérica (Pena et al., 2025).

En el marco del presente proyecto, los datos generados por TRANSMOW se utilizarán como base para implementar y validar la herramienta computacional diseñada para optimizar el análisis de mezclas de masas de agua.

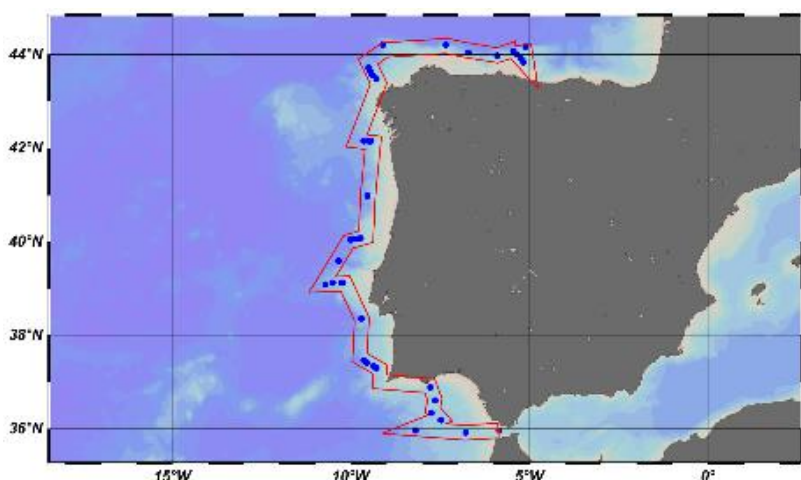


Figura 4. Localización geográfica de las estaciones de muestreo (puntos azules) durante la campaña oceanográfica TRANSMOW en el Atlántico nororiental, en torno a la Península Ibérica (Transecto delimitado por la línea roja). Mapa realizado con Ocean Data View.

2.2.2. Datos y técnicas de muestreo

El área de estudio de este trabajo son las regiones atlánticas adyacentes de la Península Ibérica, incluyendo el entorno del Estrecho de Gibraltar. Esta zona representa un punto crítico para el intercambio de masas de agua entre el mar Mediterráneo y el océano Atlántico.

Con el objetivo de facilitar la aplicación del análisis multiparamétrico óptimo (OMPA), en este trabajo se han seleccionado exclusivamente las estaciones atlánticas de la campaña TRANSMOW. En total, se dispone de 39 estaciones hidrográficas distribuidas de forma estratégica a lo largo de la plataforma y talud continental y diversas cuencas profundas (**Fig. 4**). En cada una de estas estaciones se llevaron a cabo perfiles CTD y se recolectaron muestras de agua mediante botellas Niskin, permitiendo una caracterización detallada de la columna de agua. Los datos utilizados en este estudio comprenden variables físicas y químicas medidas in situ, almacenadas en formato tabular para su posterior tratamiento mediante la herramienta computacional desarrollada (**Tabla 1**).

Codi	Date	Longitude	Latitude	Pressure (dbar)	θ (°C)	S_p (PSU)	Oxygen ($\mu\text{mol/kg}$)	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
ST11_10	May 03 2021	-7.7467	36.3431	757.0	12.91	36.4184	188.8	750.0
ST11_11	May 03 2021	-7.7467	36.3431	665.0	11.99	36.0712	181.8	659.0
ST11_12	May 03 2021	-7.7467	36.3431	664.0	11.98	36.0682	181.9	658.0
ST11_13	May 03 2021	-7.7467	36.3431	605.0	10.97	35.6801	172.0	599.0
ST11_14	May 03 2021	-7.7467	36.3431	605.0	10.98	35.6823	172.7	600.0
ST11_15	May 03 2021	-7.7467	36.3431	454.0	11.50	35.6145	189.0	451.0
ST11_16	May 03 2021	-7.7467	36.3431	454.0	11.51	35.6137	189.1	450.0
ST11_17	May 03 2021	-7.7467	36.3431	454.0	11.51	35.6131	189.1	451.0
ST11_18	May 03 2021	-7.7467	36.3431	454.0	11.51	35.6139	189.4	450.0
ST11_19	May 03 2021	-7.7467	36.3431	201.0	13.56	35.8088	205.1	199.0
ST11_20	May 03 2021	-7.7467	36.3431	202.0	13.57	35.8097	205.3	200.0
ST11_21	May 03 2021	-7.7467	36.3431	69.0	16.42	36.3043	230.9	69.0
ST11_22	May 03 2021	-7.7467	36.3431	67.0	16.54	36.3231	230.5	67.0
ST11_23	May 03 2021	-7.7467	36.3431	21.0	18.26	36.4445	243.1	21.0

Tabla 1. Ejemplo de datos hidrográficos recogidos en una de las estaciones (ST11) de la campaña TRANSMOW (θ : Temperatura Potencial; S_p : Salinidad Práctica).

2.3. Oceanografía de la zona de estudio

A continuación, se describirán las principales masas de agua características del área de estudio con especial atención a aquellas presentes en las proximidades del margen ibérico (**Fig. 5**). Estas masas de agua son las principales contribuyentes en los diferentes procesos de mezcla en las muestras recogidas durante la campaña TRANSMOW. La clasificación de las masas de agua se realiza a partir de intervalos de densidad neutra (γ^2), según lo propuesto por Liu y Tanhua (2021) (**Tabla 2**), y tomando como referencia las observaciones obtenidas en el estudio GEOVIDE (García-Ibáñez et al., 2018).

GEOVIDE 2014 consistió en dos secciones hidrográficas: la séptima repetición de la línea OVIDE desde Lisboa (Portugal) hasta Cabo Farewell (Groenlandia), y una sección a través del Mar del Labrador desde Cabo Farewell hasta St. John's (Canadá) (**Fig. 5c**).

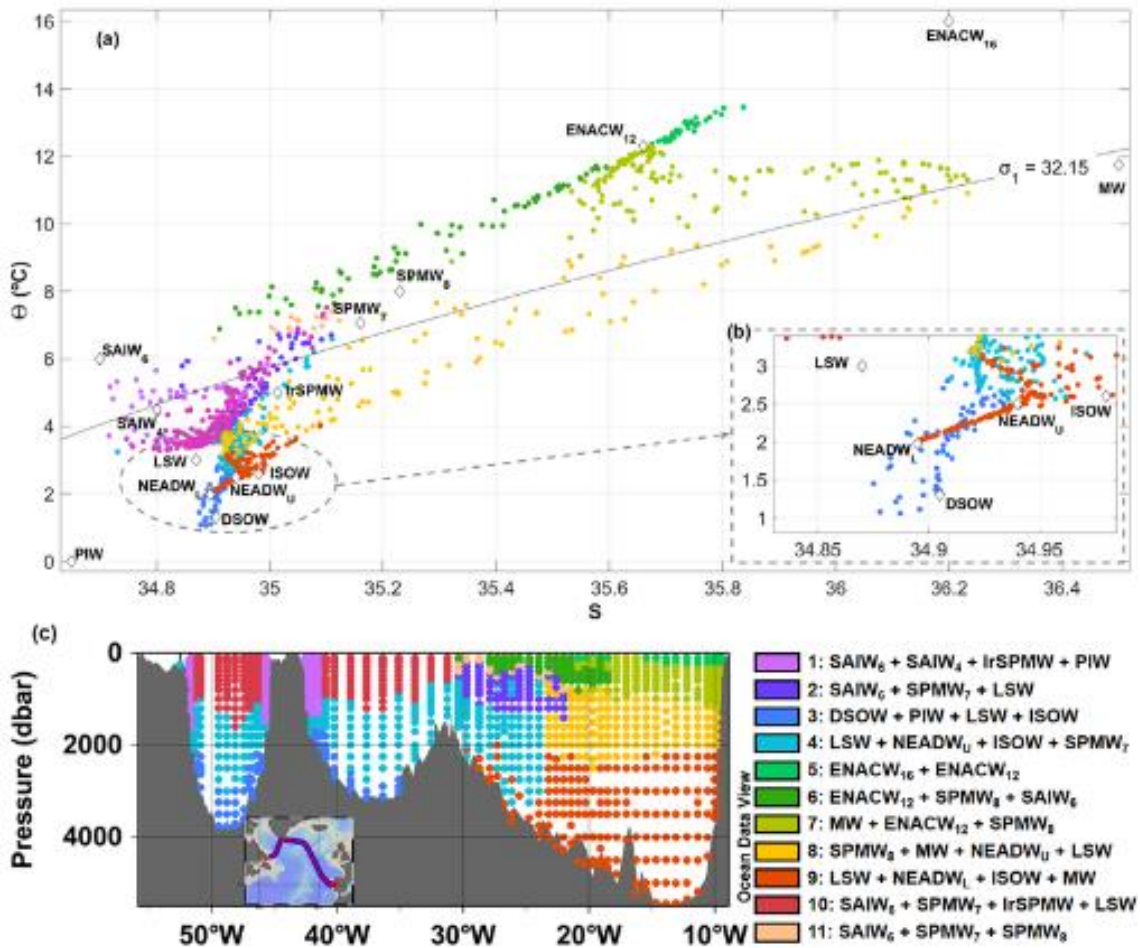


Figura 5. (a) Diagrama (θ)/(S) que incluye las "masas de agua tipo" y (b) ampliado para aguas profundas. También se representa gráficamente la isopícula $\sigma_1 = 32,15 \text{ kg/m}^3$ que delimita los extremos superior e inferior de la AMOC en la sección GEOTRACES-GA01. (c) Distribución de los grupos de mezcla a lo largo de la sección. La codificación por colores representa los grupos de mezcla. De García-Ibáñez et al. (2018).

2 Variable termodinámica que representa la densidad de una parcela de agua de mar al ser desplazada adiabáticamente a lo largo de superficies neutrales, donde no hay intercambio de energía potencial con el entorno. Esta definición permite identificar y seguir masas de agua que se mueven lateralmente en la columna oceánica sin alteraciones significativas en su estructura interna (Jackett & McDougall, 1997).

2.3.1 Capa superior ($\gamma < 27.10 \text{ kg/m}^3$)

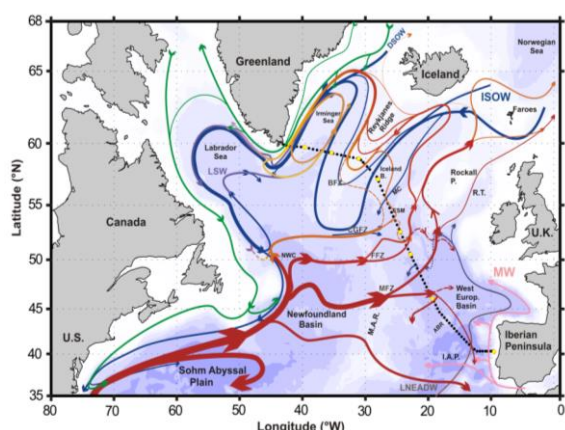


Figura 6. Esquema de la circulación a gran escala del giro subpolar del Atlántico Norte. La circulación profunda delimitada por la isopícnica $\sigma_{\theta} = 27,80$ se muestra en azul. La corriente del Atlántico Norte se muestra en rojo. Las abreviaturas indican la Dorsal Atlántica Meridional (MAR), la Zona de Fractura de Charlie-Gibbs (CGFZ), la Zona de Fractura de Bight (BFZ) y el Esquina Noroeste (NWC). De Danialt et al. (2016).

En la región más superficial del Atlántico norte, justo por debajo de la capa de mezcla, se encuentran las aguas centrales, formadas mediante procesos de subducción. Durante el invierno, el enfriamiento de la superficie marina incrementa la densidad del agua, permitiendo que esta se hunda isopícnicamente por debajo de la termoclina, alcanzando profundidades de $\sim 500 \text{ m}$ (Liu & Tanhua, 2021). En el Atlántico norte, las aguas centrales se clasifican principalmente en dos tipos: la *Eastern North Atlantic Central Water* (ENACW), generada entre $39^{\circ}\text{N} - 48^{\circ}\text{N}$ y $20^{\circ}\text{W} - 35^{\circ}\text{W}$ en la región *inter-gyre* del Atlántico nororiental, y la *Western North Atlantic Central Water* (WNACW), que se origina al oeste del océano, en el borde sur de la Corriente del Golfo (**Fig. 7**).

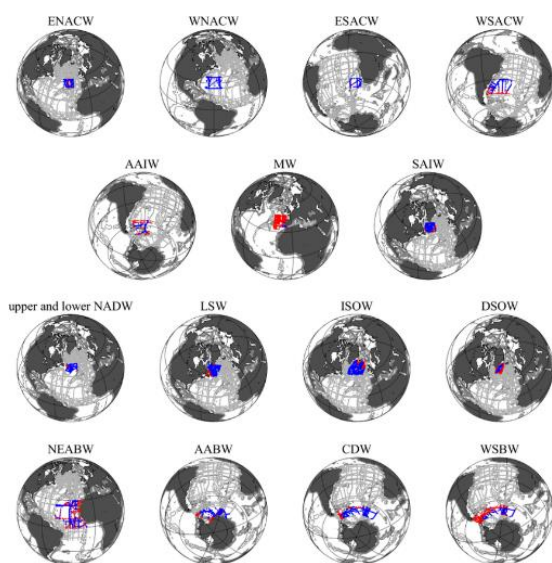


Figura 7. Áreas de formación de las 16 principales masas de agua en el Atlántico. Los puntos rojos muestran estaciones en el área de formación, los puntos azules son estaciones donde se encontraron las "masas de agua tipo". De Liu y Tanhua (2021).

Las aguas centrales son generalmente transportadas por los giros subtropicales hacia latitudes más altas, donde modifican sus características originales (T, S). Parte de la ENACW es capturada por la *North Atlantic Current* (NAC), continuación de la Corriente del Golfo hacia el noreste (**Fig. 6**), lo que permite su desplazamiento hacia regiones más septentrionales (García-Ibáñez et al., 2018). Al aproximarse a la costa occidental de la Península Ibérica, la ENACW es atrapada por la circulación superficial y subsuperficial asociada al afloramiento costero y a los sistemas de corrientes de borde oriental (Peliz et al., 2005). Así, esta masa de agua alcanza el

margen ibérico en la capa superior de la columna de agua, aproximadamente entre los 100 y 600 metros de profundidad. En nuestra área de estudio esta masa de agua está ampliamente representada.

La ENACW se caracteriza por un amplio rango térmico dependiente de la latitud y la estación, salinidades relativamente elevadas y bajos niveles de nutrientes. Dada su variabilidad, la ENACW se divide comúnmente en dos variantes principales: ENACW16 y ENACW12. La ENACW16, también denominada ENACW subtropical (ENACW_{st}) es predominante en latitudes subtropicales, presentando temperaturas en torno a los 16°C y salinidades de 36.2 PSU (**Tabla 3**), lo que la confiere densidades relativamente bajas (26.88 kg/m^3) (**Tabla 2**) que la sitúan mayormente en la capa superficial. A medida que esta masa avanza hacia el norte, se enfría progresivamente

y da lugar a la ENACW12, también conocida como ENACW subpolar (ENACW_{sp}) que alcanza temperaturas cercanas a los 12 °C (**Tabla 3**) y adquiere mayor densidad neutra (27.12 kg/m³) (**Tabla 2**), desplazándose por debajo de la ENACW16 (García-Ibáñez et al., 2018; Liu & Tanhua, 2021).

SWTs	Θ (°C)	S_p (PSU)	O_2 ° (μmol/kg)	$Si(OH)_4$ ° (μmol/kg)	NO_3 ° (μmol/kg)
ENACW ₁₆	16.0 ± 0.6	36.20 ± 0.06	246 ± 7	1.87 ± 0.12	0.00 ± 0.15
ENACW ₁₂	12.3 ± 1.6	35.66 ± 0.06	251 ± 8	1.3 ± 0.9	8.0 ± 1.1
SPMW ₈	8.0 ± 0.6	35.23 ± 0.06	289 ± 9	2.7 ± 1.9	11.4 ± 1.3
SPMW ₇	7.1 ± 0.6	35.16 ± 0.06	280 ± 8	5.20 ± 0.15	12.83 ± 0.15
IrSPMW	5.0 ± 0.6	35.00 ± 0.06	310 ± 9	5.9 ± 0.4	14.1 ± 0.4
LSW	3.40 ± 0.4	34.86 ± 0.1	307 ± 9	6.9 ± 0.7	14.8 ± 0.7
SAIW ₆	6.0 ± 0.5	34.70 ± 0.3	297 ± 9	6.0 ± 2.4	13.3 ± 1.2
SAIW ₄	4.5 ± 0.5	34.80 ± 0.3	290 ± 9	0.0 ± 2.4	0.0 ± 1.2
MW	11.7 ± 0.2	36.50 ± 0.07	190 ± 6	6.30 ± 0.15	13.2 ± 0.2
ISOW	2.7 ± 0.1	35.00 ± 0.02	294 ± 9	11.8 ± 0.9	14.0 ± 0.6
DSOW	1.30 ± 0.2	34.905 ± 0.01	314 ± 9	7.0 ± 0.5	12.9 ± 0.8
PIW	0.0 ± 0.2	34.65 ± 0.33	320 ± 10	8.4 ± 2.5	13.4 ± 1.2
NEADW _u	2.5 ± 0.5	34.940 ± 0.07	274 ± 8	29.4 ± 0.6	18.1 ± 0.5
NEADW _L	1.98 ± 0.03	34.895 ± 0.003	252 ± 8	48.0 ± 0.3	22.0 ± 0.5

Tabla 2. Tabla que presenta el valor medio y la desviación estándar de todas las variables para el conjunto de “masas de agua tipo” consideradas en Liu y Tanhua (2021).

El enfriamiento progresivo de las aguas subtropicales transportadas hacia el norte por la Corriente del Atlántico Norte (NAC) en el seno del Giro Subpolar (GSP) del Atlántico Norte favorece la formación de la *Subpolar Mode Water* (SPMW), una masa de agua intermedia generada por convección invernal profunda en los mares de Islandia, Irminger y Labrador (Daniault et al., 2016).

Layer	SWTs	Conserv. Temp (°C)	Abs. Salinity	Neutral Density (kg/m ³)	O_2 (μmol/kg)	Silicate (μmol/kg)	Phosphate (μmol/kg)	Nitrate (μmol/kg)
Upper layer	ENACW (upper)	13.72	36.021	26.887	243.1	2.49	0.41	7.03
	ENACW (lower)	11.36	35.689	27.121	216.3	5.33	0.75	12.14
	WNACW (upper)	18.79	36.395	26.313	213.0	0.72	0.20	4.88
	WNACW (lower)	15.17	36.634	26.554	193.1	1.00	0.28	4.86
	ESACW (upper)	9.44	35.009	28.805	212.6	2.13	0.38	10.12
	ESACW (lower)	9.40	34.933	28.725	214.2	4.89	0.68	16.42
	WSACW (upper)	13.54	35.004	28.925	223.8	3.36	0.52	8.34
	WSACW (lower)	12.30	34.294	28.935	209.8	3.36	0.38	10.43
Intermediate layer	AAIW	1.78 ± 1.02	34.206 ± 0.083	27.409 ± 0.111	300.7 ± 16.2	21.09 ± 4.62	1.95 ± 0.11	27.33 ± 1.92
	SAIW	3.62 ± 0.43	34.994 ± 0.057	27.831 ± 0.049	294.6 ± 9.7	8.53 ± 0.85	1.06 ± 0.07	15.55 ± 1.06
	MW	12.21 ± 1.77	36.682 ± 0.128	27.343 ± 0.117	228.3 ± 11.3	4.45 ± 0.92	0.62 ± 0.08	10.25 ± 0.81
Deep and overflow	Upper NADW	3.33 ± 0.31	35.071 ± 0.027	27.942 ± 0.027	302.7 ± 8.8	13.84 ± 1.20	1.11 ± 0.05	19.16 ± 0.48
	Lower NADW	2.96 ± 0.21	35.083 ± 0.019	27.980 ± 0.022	293.1 ± 6.1	13.16 ± 1.42	1.10 ± 0.06	19.60 ± 0.54
	LSW	3.20 ± 0.36	34.895 ± 0.053	27.828 ± 0.029	298.6 ± 6.3	10.84 ± 1.36	1.00 ± 0.05	17.66 ± 0.53
	ISOW	1.07 ± 0.26	35.052 ± 0.028	28.001 ± 0.030	277.8 ± 4.4	11.68 ± 1.55	1.05 ± 0.06	18.43 ± 0.64
	DSOW	1.20 ± 0.12	34.980 ± 0.022	28.101 ± 0.024	272.2 ± 3.5	13.08 ± 1.54	1.13 ± 0.06	19.04 ± 0.48
Bottom layer	AABW	-0.46 ± 0.24	34.830 ± 0.009	28.357 ± 0.048	239.0 ± 8.2	124.87 ± 2.36	2.27 ± 0.03	32.82 ± 0.45
	CDW	0.02 ± 0.14	34.947 ± 0.020	28.324 ± 0.033	251.8 ± 6.3	110.53 ± 2.33	2.08 ± 0.04	30.90 ± 0.42
	WSBW	-0.79 ± 0.15	34.780 ± 0.011	28.421 ± 0.038	231.8 ± 5.7	126.04 ± 3.32	2.23 ± 0.03	33.25 ± 0.49
	NEABW	1.95 ± 0.06	35.061 ± 0.008	28.117 ± 0.005	245.9 ± 3.7	47.06 ± 2.32	1.49 ± 0.04	22.27 ± 0.53

Tabla 3. Propiedades que caracterizan las “masas de agua tipo” consideradas en el estudio de García-Ibáñez et al. (2018) con sus correspondientes desviaciones estándar.

La SPMW se distingue por sus salinidades cercanas a 35.2 PSU y densidades neutras superiores a 27.30 kg/m³ (Jenkins et al., 2015). Al igual que otras masas de agua, no constituye una entidad única, sino que aparece en diferentes variantes según su grado de transformación y mezcla. La forma más cálida y reciente que se origina por el enfriamiento inicial de la ENACW es la SPMW8 con temperaturas cercanas a 8.0 °C (**Tabla 2**). A medida que esta masa se mezcla con aguas más frías y densas experimenta una convección más profunda, da lugar a variantes más frías como la SPMW7 (7.1 °C), que se sitúa más al oeste, y finalmente a la IrSPMW (5.0 °C), formada localmente en el mar de Irminger bajo condiciones convectivas particularmente intensas (García-Ibáñez et al., 2018). Estas distintas variantes de la SPMW se distribuyen a lo largo del Atlántico Norte, siendo transportadas por las ramas de la NAC y por circulaciones regionales asociadas (Daniault et al., 2016).

2.3.2 Capa intermedia ($27.10 \leq \gamma < 27.90 \text{ kg/m}^3$)

En la capa intermedia del Atlántico se encuentra la Mediterranean Water (**MW**), una masa de agua originada en el mar Mediterráneo, donde las altas tasas de evaporación incrementan notablemente la salinidad que rondan los 38.5 PSU (Lafuente & Aldeanueva 2001). Al salir a través del Estrecho de Gibraltar como Mediterranean Overflow Water (MOW), estas aguas experimentan una intensa mezcla con las aguas atlánticas circundantes, especialmente con la ENACW (**Fig. 7**). Este proceso modera sus propiedades originales, dando lugar a la MW propiamente dicha (Liu & Tanhua, 2021).

La MW es fácilmente distinguible en el Atlántico oriental por su alta salinidad (36.5 PSU), temperaturas elevadas (11.7°C) para su profundidad ($\sim 800 - 1500 \text{ m}$), y por su bajo contenido en nutrientes como nitrato, fosfato y silicato (Liu & Tanhua, 2021). Su trayecto incluye un ascenso inicial hasta unos $800 - 1200 \text{ metros}$ de profundidad, donde forma una corriente subsuperficial que bordea el margen ibérico en dirección norte (García-Lafuente et al., 2006) (**Fig. 6**). En nuestra zona de estudio, esta masa de agua tiene una notable presencia en la capa intermedia.

La Antarctic AAIW es una masa de agua fría ($\sim 3.5^\circ\text{C}$), bien oxigenada ($\sim 260 \mu\text{mol/kg}$) y rica en nutrientes (**Tabla 2**) que se forma predominantemente en la región subantártica. Es formada a partir de aguas superficiales subantárticas frías y de baja salinidad que, al transformarse, generan una masa de agua que se propaga hacia el norte a lo largo de las principales cuencas oceánicas. Debido a la aceleración de Coriolis su desplazamiento hacia el norte ocurre a lo largo del margen occidental de la cuenca en el hemisferio sur, y desplazándose hacia el margen oriental en el hemisferio norte, situándose a profundidades de aproximadamente $1000 - 1500 \text{ m}$, por debajo de las aguas centrales subtropicales y por encima del North Atlantic Deep Water (NADW) (Liu & Tanhua, 2021; Jenkins et al., 2015).

Otra masa de agua intermedia es la Subarctic Intermediate Water (SAIW), que se forma en la región subpolar del noroeste atlántico, especialmente al sur de Groenlandia y en el margen oriental del Canadá atlántico (**Fig. 7**). Su origen está ligado a la mezcla entre las aguas frías y dulces de la Corriente del Labrador y las más cálidas y salinas transportadas por la North Atlantic Current (NAC). Esta formación ocurre en la zona de convergencia subpolar, donde la estratificación vertical se debilita, favoreciendo la subducción de aguas modificadas a profundidades intermedias, típicamente entre 500 y 1000 m . La SAIW presenta temperaturas bajas ($4.5 - 6^\circ\text{C}$), salinidad moderada ($\sim 34.75 \text{ PSU}$) (**Tabla 3**) y densidades neutras entre 27.70 kg/m^3 (**Tabla 2**). Esta masa de agua se desplaza hacia el sureste a través del Atlántico Norte, atravesando la Dorsal Mesoatlántica e interactuando con otras masas intermedias, como la MW y la AAIW, modificando así las propiedades de las capas intermedias del océano Atlántico (García-Ibáñez et al., 2018; Liu & Tanhua, 2021).

2.3.3 Capa profunda ($27.90 \leq \gamma < 28.10 \text{ kg/m}^3$)

Bajo condiciones invernales de enfriamiento intenso, como las que se presentan en el mar de Labrador, las Subpolar Mode Waters (SPMW) pueden experimentar un incremento significativo en su densidad que conduce a la formación de la Labrador Sea Water (**LSW**) (**Fig. 7**). Esta masa de agua, junto con las aguas de aguas densas que se vierten desde los mares nórdicos, constituye uno de los componentes principales de la rama profunda y fría de la Circulación Meridional de Retorno (MOC) (Danialt et al., 2016). El proceso de formación de la LSW tiene lugar a través de eventos de ventilación convectiva profunda, que dan origen a una capa homogénea caracterizada por baja salinidad (~ 34.8 PSU), temperaturas inferiores a 4°C , altas concentraciones de oxígeno disuelto ($\sim 307 \text{ } \mu\text{mol/kg}$) (**Tabla 3**) y densidades neutras comprendidas entre 27.7 y 28.1 kg/m^3 (**Tabla 2**) (García-Ibáñez et al., 2018; Liu & Tanhua, 2021).

Una vez formada, la LSW abandona la cuenca del Labrador principalmente a través del *Deep Western Boundary Current* (DWBC), desplazándose hacia el sur por el margen continental occidental. La LSW logra cruzar la Dorsal Mesoatlántica a través de zonas de fractura y canales profundos, siendo la fractura de Charlie-Gibbs uno de los principales corredores de conexión hacia la cuenca oriental del Atlántico. A lo largo de su trayecto, interactúa con otras masas profundas originadas en las altas latitudes del Atlántico Norte, como la Denmark Strait Overflow Water (DSOW) y la Iceland - Scotland Overflow Water (ISOW), contribuyendo de manera fundamental a la estructura y ventilación del océano profundo (Lherminier et al., 2010).

La DSOW se origina en el mar de Groenlandia y fluye hacia el sur por el Atlántico Norte a través del Estrecho de Dinamarca (**Fig. 7**). Se forma a partir de la mezcla y enfriamiento invernal de aguas árticas y subárticas, las cuales alcanzan densidades suficientes para superar el umbral del estrecho y descender por la pendiente continental hacia el suroeste. Esta masa se distingue por temperaturas inferiores a 2°C , salinidad moderadamente alta (~ 34.9 PSU) (**Tabla 3**) y densidades neutras superiores a 28.15 kg/m^3 (**Tabla 2**) (Liu & Tanhua, 2021).

Por su parte, la ISOW se forma en el mar de Noruega y el mar de Islandia (**Fig. 7**), y accede al Atlántico Norte a través del canal de Faroe Bank. Esta masa se origina mediante el enfriamiento de aguas atlánticas que, tras ingresar al mar de Noruega, se transforman al mezclarse con aguas árticas más frías y densas. Una vez densificada, desborda el umbral del canal y desciende por la vertiente oriental del Atlántico Norte. Dentro del giro subpolar del Atlántico Norte, la ISOW fluye hacia el sur al este de la dorsal de Reykjanes en la cuenca de Islandia (**Fig. 6**). La mayor parte del flujo de ISOW hacia el sur llega al Mar de Irminger a través de la Zona de Fractura Charlie-Gibbs (CGFZ) y la Zona de Fractura Bight (Racapé et al., 2019). Sus propiedades típicas incluyen temperaturas entre 2.6 y 2.8°C , salinidad elevada (35.0 g/kg) (**Tabla 2**) y densidades neutras cercanas o superiores a 28.15 kg/m^3 (**Tabla 3**) (García-Ibáñez et al., 2018; Liu & Tanhua, 2021).

A medida que la LSW, DSOW e ISOW se propagan por la cuenca de Irminger, se mezclan en el rango de profundidades comprendido entre 2000 y 3000 metros (**Fig. 6**), dando lugar a la formación del North Atlantic Deep Water (NADW) (García-Ibáñez et al., 2018). Esta masa representa una de las principales componentes profundas del sistema oceánico global, y constituye la rama descendente de la Circulación Meridional del Atlántico (AMOC) (Lherminier et al. 2010). La NADW presenta temperaturas entre 2 y 4°C , salinidad de aproximadamente 34.9 PSU, y densidades neutras entre 27.85 y 28.10 kg/m^3 (**Tabla 2**) (Jenkins et al., 2015; Liu & Tanhua, 2021).

La NADW se clasifica según su trayectoria: la Northwest Atlantic Deep Water (NWADW), que fluye hacia el sur por el DWBC, y la Northeast Atlantic Deep Water (**NEADW**), que tras cruzar la Dorsal Mesoatlántica se propaga hacia las cuencas orientales (Liu & Tanhua, 2021). Una fracción pequeña de la *Antarctic Bottom Water* (AABW) se puede mezclar con la NADW en las profundidades del Atlántico, contribuyendo a la formación de la *Northeast Atlantic Bottom Water* (NEABW). La NEADW, en particular, se subdivide en dos capas estratificadas. La fracción superior (uNEADW) surge de la mezcla entre LSW e ISOW, caracterizada por temperaturas entre aproximadamente 2.5 °C y salinidades alrededor de 34.9 mientras que la inferior (INEADW) incorpora una mayor proporción de DSOW, con temperaturas más bajas (aproximadamente 2°C) y salinidades ligeramente más bajas (**Tabla 3**) (Liu & Tanhua, 2021; García-Ibáñez et al., 2018)

Por debajo de la capa profunda, se encuentra la capa de fondo ($\sigma_t > 28.10 \text{ kg/m}^3$). Aquí en el Atlántico sur profundo, la NADW coexiste con la Antarctic Bottom Water (AABW), una masa de agua extremadamente fría y densa (**Tabla 3**), originada principalmente en el mar de Weddell, aunque también con contribuciones del mar de Ross (**Fig. 7**). A medida que la AABW se desplaza hacia el norte por debajo de la NADW, sufre procesos de mezcla con aguas suprayacentes como la *Circumpolar Deep Water* (CDW), lo que modifica su composición y da lugar a la formación de la *Northeast Atlantic Bottom Water* (NEABW) al norte del ecuador. La NEABW conserva el origen antártico, pero adquiere una nueva identidad química en las profundidades del Atlántico nororiental, caracterizándose por temperaturas cercanas a 1.8°C, salinidades cercanas a 35 g/kg, alto silicato y bajos niveles de oxígeno disuelto (**Tabla 3**) (Liu & Tanhua, 2021).

3. Metodología

3.1 Diseño y estructura de la herramienta computacional

La herramienta ha sido implementada en el lenguaje de programación Python (www.python.org), utilizando el entorno interactivo Jupyter Lab debido a la flexibilidad y robustez del lenguaje, así como en la disponibilidad de una amplia gama de librerías especializadas, tales como *NumPy*, *Pandas*, *SciPy*, y *Matplotlib*, que permiten realizar análisis estadísticos avanzados, manipulación de grandes volúmenes de datos y visualización científica de manera eficiente (Kluyver Thomas et al., 2016).

A continuación, se describe el funcionamiento de la herramienta en el contexto específico de la campaña oceanográfica TRANSMOW, con el propósito de ilustrar su estructura interna, justificar las decisiones metodológicas adoptadas, y explicar la elección de funciones, parámetros y procedimientos empleados en cada etapa del análisis.

A lo largo de esta sección se incluyen fragmentos representativos del código fuente con el objetivo de ilustrar la estructura general de la herramienta. Para quienes deseen consultar el funcionamiento detallado del código, este se encuentra completamente documentado y disponible en el repositorio GitHub:

https://github.com/aitana-tomas/OMPA_MonteCarlo_Water_Mass_Mixing_Analysis_with_Uncertainty.git

3.1.1 Importación y configuración de datos

En primer lugar es necesario realizar la importación de tres conjuntos de datos iniciales: (1) matriz de valores de trazadores (en nuestro caso; salinidad, temperatura potencial, oxígeno y *spiciness*) para cada masa de agua (*endmember*) incorporada (ENACW16, ENACW12, MW, LSW, NEADW), (2) matriz de desviaciones estándar asociadas a estos trazadores (es decir, la incerteza asociada a las definiciones de los *endmembers*), y (3) el conjunto completo de datos observacionales de la campaña, que incluye valores de los trazadores seleccionados con su correspondiente información espacial (latitud, longitud y profundidad) y temporal.

El modelo requiere además la definición inicial del vector de errores asociados al error de medida de cada trazador para cada trazador (por ejemplo, en oceanografía podemos medir la temperatura del agua con una precisión mucho mayor que la concentración de oxígeno disuelto), el número de masas de agua consideradas y el factor de ponderación para la restricción de balance de masas. La elección de estos valores iniciales impacta directamente en el vector de ponderación, como se explicó previamente en el apartado 2.2.2.

3.1.2 Generación de *endmembers* aleatorios

El método Monte Carlo implementado se basa en la función [generar_endmembers_y_errores](#). Esta función genera valores numéricos pseudo-aleatorios en cada una de las propiedades de las masas de agua siguiendo distribuciones normales centradas en los valores medios observados y con dispersiones correspondientes a las desviaciones estándar documentadas.

```
def generar_endmembers_y_erroses(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_erroses(design_M, design_M_desvest,
sig_errors)
```

Simultáneamente, la función asigna de forma arbitraria una incertidumbre del $\pm 10\%$ en el vector de errores analíticos definido anteriormente, incorporando así la incertidumbre instrumental en el análisis (no todos los instrumentos tienen la misma precisión). Este paso es esencial para romper con el carácter determinista del enfoque OMPA tradicional, ya que introduce una componente estocástica que permite representar de manera más realista la variabilidad natural e instrumental asociada al muestreo. Al generar múltiples escenarios de mezcla mediante perturbaciones aleatorias dentro de rangos plausibles, se incorpora explícitamente la incertidumbre inherente al sistema.

3.1.3 Estandarización de matrices

Para garantizar la comparabilidad entre trazadores con diferentes magnitudes físicas y unidades, se implementa un proceso de estandarización mediante la transformación z-score (Pedregosa et al., 2011). Para ello, se utiliza la función *preprocessing.scale* de la biblioteca *scikit-learn*. Este procedimiento normaliza cada variable para que presente media cero y desviación estándar unitaria, asegurando que todos los trazadores contribuyan proporcionalmente al análisis independientemente de su escala original.

Adicionalmente, se añade un vector de unos representando la restricción de conservación de masa a la matriz de diseño estandarizada. Esta restricción es crucial para la posterior optimización, ya que impone que la suma de contribuciones fraccionales de las diferentes masas de agua debe aproximarse a la unidad.

3.1.4 Ponderación paramétrica

No todos los trazadores utilizados poseen la misma capacidad discriminatoria para identificar diferentes masas de agua. Por ello, el método OMPA-MC implementa un mecanismo de ponderación paramétrica mediante la función [calcular_vector_ponderacion](#). Esta función determina pesos relativos basados en la varianza de valores entre masas de agua para cada parámetro en la matriz de diseño construida de forma estocástica, normalizada por los errores asociados, como se ha explicado previamente. El vector de ponderación incorpora finalmente el término de balance de masas con un peso significativamente alto (1000), asegurando que la suma de contribuciones fraccionales se aproxime a la unidad (permitiendo un margen de error del 0.1% para garantizar que el balance de masas sea lo suficientemente preciso).

```
def calcular_vector_ponderacion(design_M, n_WM, sig_errors, M):
    mean_sub = design_M.iloc[:,1:].sub(design_M.iloc[:,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)
```

Estas ponderaciones se aplican a las matrices estandarizadas mediante la función [ponderar_matrices](#), amplificando la influencia de los trazadores más discriminantes en el análisis.

3.1.5 Resolución del sistema OMPA

El núcleo matemático del análisis OMPA reside en la función [calcular_ompa](#), que, para cada punto de muestreo en la matriz de datos medidos, implementa la optimización de mínimos cuadrados no negativos que minimiza la diferencia entre las propiedades observadas y una combinación lineal de las propiedades de los *endmembers*, como se ha descrito con profundidad en el apartado 2.2.2.

```
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:].values)
```

Esta metodología parte de las dos matrices ya estandarizadas y ponderadas: la matriz de los *endmembers* de referencia, y la matriz de datos observados. El sistema algebraico se resuelve utilizando el algoritmo *scipy.optimize.nnls* (Non-Negative Least Squares) (SciPy Developers, 2023; Virtanen et al., 2020). Este procedimiento devuelve, para cada muestra, un vector de soluciones que representa las fracciones óptimas de cada masa de agua, y un residuo que cuantifica la magnitud del error del ajuste. Un residuo bajo indica que la combinación lineal propuesta representa adecuadamente la muestra observada.

3.1.6 Implementación de Monte Carlo

Una vez desarrollada la lógica algebraica del OMPA se realiza la integración de las funciones anteriores en un sistema de Monte Carlo mediante la función [montecarlo_omp](#). Esta función ejecuta múltiples iteraciones ($n=1000$ en este estudio) del análisis OMPA completo, cada iteración con una matriz de *endmembers* y de errores diferente, de acuerdo las distribuciones de probabilidad definidas anteriormente.

En cada iteración, el algoritmo extrae los metadatos relevantes, genera *endmembers* aleatorios, estandariza matrices, calcula y aplica ponderaciones, y finalmente resuelve el sistema OMPA. Los resultados de cada simulación se apilan, generando un conjunto de 1000 posibles soluciones para cada muestra de agua analizada.

```
def montecarlo_omp(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_omp(W_design_std, W_data_std, design_M.columns[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)
    return tabla_resultados, lista_w_vectors
n_simulaciones=1000
tabla_resultados_omp, lista_w_vectors = montecarlo_omp(n_simulaciones, design_M, design_M_desvest,
sig_errors, M, n_WM, data)
```

4. Aplicación a los datos de TRANSMOW

4.1. Definición de *endmembers* para la zona de estudio

Según la regla $M - 1$, empleada en este análisis (apartado 2.2.2), es posible seleccionar hasta cinco masas de agua en el área de estudio, ya que contamos con únicamente con cuatro trazadores conservativos: salinidad práctica (S), temperatura potencial (θ), oxígeno disuelto³ y *spiciness*. El oxígeno ha sido empleado en este trabajo como trazador cuasi-conservativo en las condiciones hidrográficas del margen ibérico atlántico.

La *spiciness* es una variable escalar adiabática utilizada para distinguir entre masas de agua que presentan la misma densidad potencial, pero que difieren en su combinación de temperatura y salinidad. En otras palabras, dos masas de agua con densidad semejante, una puede ser más “picante” (*spicy*), es decir, más cálida y salina, que otra masa de agua más “fresca” (*mint*), caracterizada por temperaturas más bajas y menor salinidad (Flament, 2002).

Para la identificación de los *endmembers*, se analizaron todos los datos disponibles de las estaciones de muestreo y se representaron en un diagrama de temperatura-salinidad (T - S) (**Fig. 8**). Sobre este diagrama se representan las principales masas de agua presentes en la región de estudio (**Fig. 8a**). A partir de su distribución con los datos observados, se seleccionaron las cinco masas de agua más relevantes: ENACW12, ENACW16, MW, LSW y NEADWu (**Fig. 8b**).

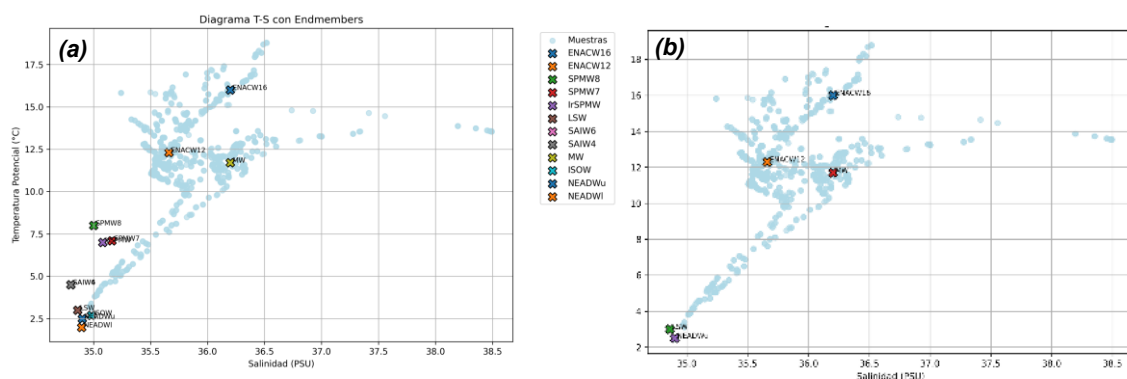


Figura 8. Diagramas T-S de las muestras recogidas durante la campaña TRANSMOW (puntos celestes) y: (a) Las masas de agua (cruces de colores con etiquetas) que potencialmente pueden contribuir de forma significativa en las muestras (propiedades físico-químicas de García-Ibañez et al. (2018)). (b) Con las cinco masas de agua (*endmembers*) seleccionadas para el análisis OMPA.

³ **S_p**: Medida adimensional de la concentración de sales en el agua de mar, expresada en unidades prácticas de salinidad (PSU), las cuales no representan unidades físicas reales, sino una escala normalizada basada en la conductividad eléctrica de la salinidad basada en la conductividad del agua de mar (PSS-78). **θ** : Temperatura (°C) que tendría una masa de agua si se desplazara adiabáticamente a la superficie (0 dbar). **Ox**: Cantidad de oxígeno ($\mu\text{mol/kg}$) disuelto en el agua, disponible para procesos biológicos (IOC et al., 2010).

Como se puede observar en el diagrama T-S (**Fig. 8**), las masas de agua superficiales presentan una mayor dispersión en el espacio T-S, lo que refleja un rango de variabilidad más amplio en sus propiedades. Esta variabilidad es esperable dado su contacto más directo con la atmósfera y los procesos estacionales. Por el contrario, las masas de agua profundas muestran una distribución más compacta, lo que indica una menor variabilidad en sus características. Esta diferencia en la amplitud de variabilidad entre masas superficiales y profundas es especialmente relevante para nuestras simulaciones, ya que influye directamente en la representación de las incertidumbres en el modelo de mezcla.

4.2. Definición de parámetros iniciales

Para la definición de los valores característicos de los *endmembers* y sus respectivas desviaciones estándar, se utilizaron los mismos valores empleados en el estudio de García-Ibáñez et al. (2018) (**Tabla 3; Tabla 4**).

<i>Variable</i>	<i>ENACW₁₆</i>	<i>ENACW₁₂</i>	<i>MW</i>	<i>LSW</i>	<i>NEADW_u</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 (μmol/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

Tabla 4. Valores medios de los trazadores (Salinidad, Temperatura Potencial, Oxígeno y Spiciness) para los *endmembers* seleccionados (ENACW16, ENACW12, MW, LSW y NEADW_u) utilizados en el análisis OMPA y sus correspondientes desviaciones estándar. Valores extraídos del estudio de García-Ibáñez et al. (2018)

A partir de estos valores, se calculó la variable *spiciness* para cada tipo de masa de agua, siguiendo las formulaciones del sistema TEOS-10, así como para las muestras medidas durante la campaña TRANSMOW (IOC et al., 2010). La desviación estándar asociada a cada valor de *spiciness* fue estimada como un porcentaje del valor medio, en función de la variabilidad esperada de cada masa de agua. Se adoptó un esquema de incertidumbre decreciente, desde un 40 % para ENACW16 (agua superficial con mayor variabilidad), 30 % para ENACW12, 20 % para MW, 10 % para LSW, hasta un 5 % para NEADW, representando así su carácter más homogéneo y estable en profundidad.

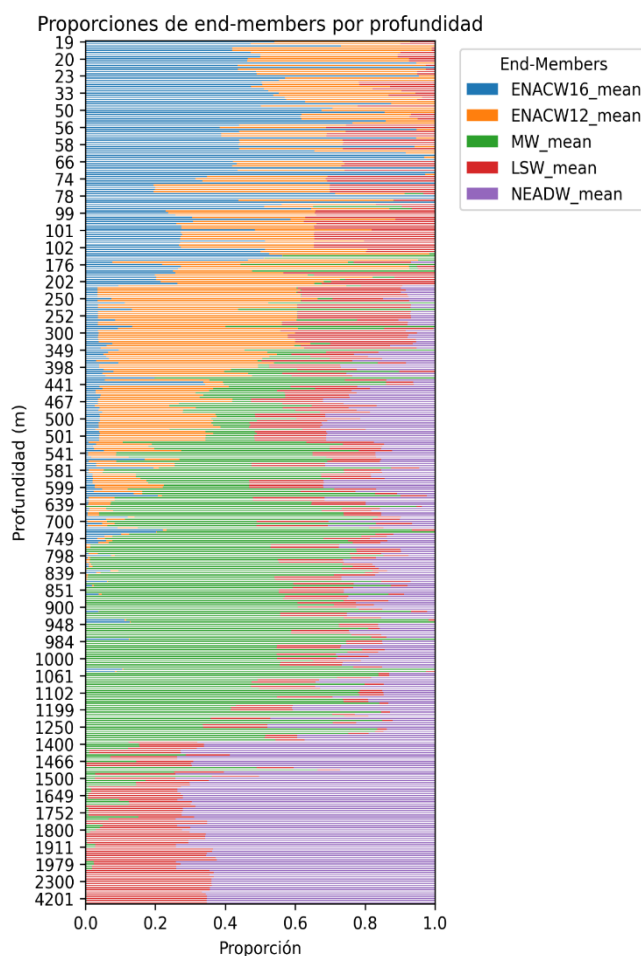
Los valores de los errores asociados a los instrumentos de medida se definieron como [sig_error](#), teniendo 0.004 (°C) para temperatura potencial, 0.02 (PSU) para salinidad, 1.5 (μmol/kg) para oxígeno y 0.005 para *spiciness*.

4.3 Resultados obtenidos

4.3.1 Distribución espacial de masas de agua

Tras realizar el análisis OMPA-MC de la contribución relativa de cada una de las masas de agua seleccionadas (**Tabla 4**), los resultados fueron representados mediante Ocean Data View (**Fig. 9**).

En general, el modelo reproduce consistentemente la distribución vertical esperada de las masas de agua (García-Ibáñez et al., 2018), evidenciando una separación coherente entre las de origen subtropical, subpolar y mediterráneo. Destaca que la ENACW16, ENACW12 y la MW alcanzan porcentajes cercanos al 100% en sus respectivas capas en las regiones más cercanas a las áreas de formación, lo que valida la eficacia del modelo en su identificación. La ENACW16 se localiza predominantemente en la capa superficial, abarcando profundidades de 0 a 200 m (**Fig. 9a**). Inmediatamente por debajo, entre los 200 y 400 m, se identifica la ENACW12 (**Fig. 9b**). La MW, por su parte, se concentra mayoritariamente entre los 400 y 1200 m (**Fig. 9c**). A mayores profundidades, la LSW muestra unas proporciones más bajas, con contribuciones de solo hasta un 40% entre los 1800 y 4000 m. No obstante, su presencia (30 - 40%) en capas intermedias y superficiales (**Fig. 9d**) sugiere potenciales dificultades del modelo para asignar correctamente las contribuciones de LSW. Finalmente, la NEADWu, también presente en capas intermedias y profundas, se distingue por porcentajes elevados llegando al 100% entre los 1000 y 4500 m (**Fig. 9e**), mostrando una superposición notable tanto con la LSW como con la capa profunda de la MW.



Uno de los aspectos más destacables es que la distribución del LSW en el área de estudio presenta un alto grado de dispersión en la columna de agua (**Fig. 10**), a diferencia de las demás masas de agua que se encuentran concentradas en un rango de profundidad concreto.

Figura 10. Perfil vertical generalizado de la proporción media relativa de los endmembers identificados (ENACW16, ENACW12, MW, LSW y NEADWu) en función de la profundidad (m) en la región de estudio de la campaña TRANSMOW.

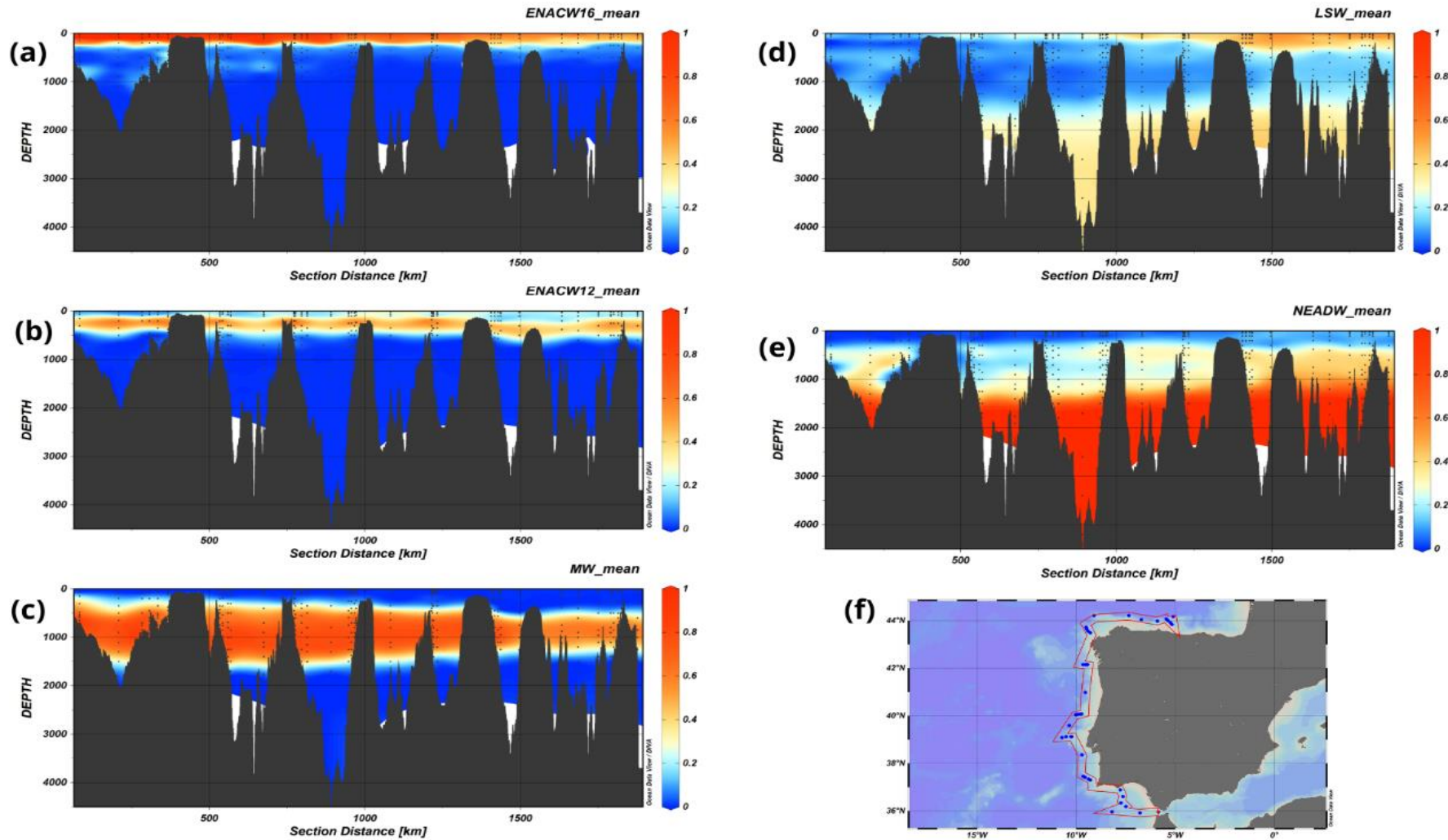


Figura 9. Distribución vertical de la fracción media estimada para las masas de agua (a) ENACW12, (b) ENACW16, (c) MW, (d) LSW y (e) NEADWu a lo largo del transecto de la campaña TRANSMOW (localización en (f)), obtenida mediante el análisis OMPA con simulaciones de Monte Carlo. La escala de colores indica la proporción media de cada masa de agua en función de la distancia (km) y la profundidad (m).

4.3.2 Evaluación de la incertidumbre

Para evaluar la incertidumbre y la fiabilidad de los resultados se crearon secciones hidrográficas verticales donde se representa la desviación estándar asociada a la contribución estimada de cada masa de agua, obtenidas mediante la aplicación del OMPA-MC (**Fig. 11**).

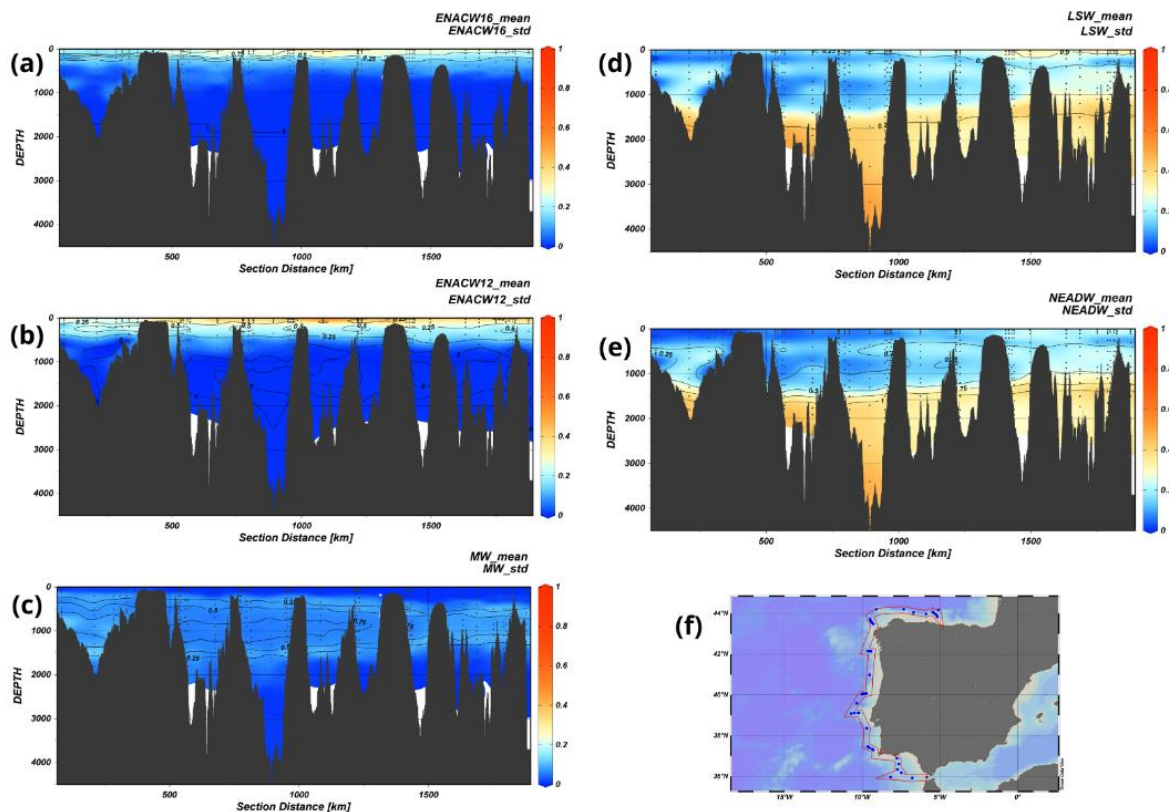


Figura 11. Secciones hidrográficas verticales a lo largo del transecto de TRANSOW (comenzando en el Estrecho de Gibraltar) mostrando la distribución espacial de la proporción media (isolíneas) y la desviación estándar (escala de colores) para la contribución de cada masa de agua: (a) ENACW16, (b) ENACW12, (c) MW, (d) LSW y (e) NEADW, obtenidas mediante el análisis OMPA con simulaciones de Monte Carlo para evaluar la incertidumbre.

Los resultados muestran que para las aguas centrales (ENACW12 y ENACW16) se localizan incertidumbres mayores (~40%) en las capas más superficiales (0-200m) de la columna de agua, posiblemente atribuidas a la existencia de una mayor variabilidad natural debida a procesos atmosféricos y a la mezcla turbulenta estacional. Sin embargo, por debajo de esta capa superficial, en la zona donde el modelo identifica la presencia predominante de estas masas (**Fig. 9a; 9b**), los valores de incertidumbre disminuyen notablemente, situándose alrededor del 20 % (**Fig. 11a; 11b**). Este patrón indica una fiabilidad considerable en la estimación de las fracciones de ENACW en profundidad.

En el caso del agua mediterránea (MW), la variabilidad es consistentemente baja a lo largo de su distribución, con valores cercanos al 0 %, lo que sugiere una elevada robustez en los resultados del modelo y, por tanto, una alta confiabilidad en la localización y proporción estimada de esta masa de agua (**Fig. 11b**).

Por el contrario, para las masas de agua más profundas, como el LSW y el NEADWu, en las regiones donde el modelo indica que estas masas están presentes en mayor proporción (**Fig. 9c; 9d**), se observa una alta variabilidad (**Fig. 11c; 11d**) alcanzando valores cercanos al 50 % en múltiples tramos de profundidad, como era de esperar según la superposición observada anteriormente (**Fig. 9d; 9e**). Este comportamiento sugiere una menor robustez y fiabilidad los porcentajes asignados a estas masas de agua.

El análisis del vector de ponderación, representado mediante violín plots (**Fig. 12**) para las variables salinidad, temperatura, oxígeno y spiciness, proporciona una visión integral sobre la distribución y comportamiento de los pesos asignados a cada parámetro dentro del modelo OMPA.

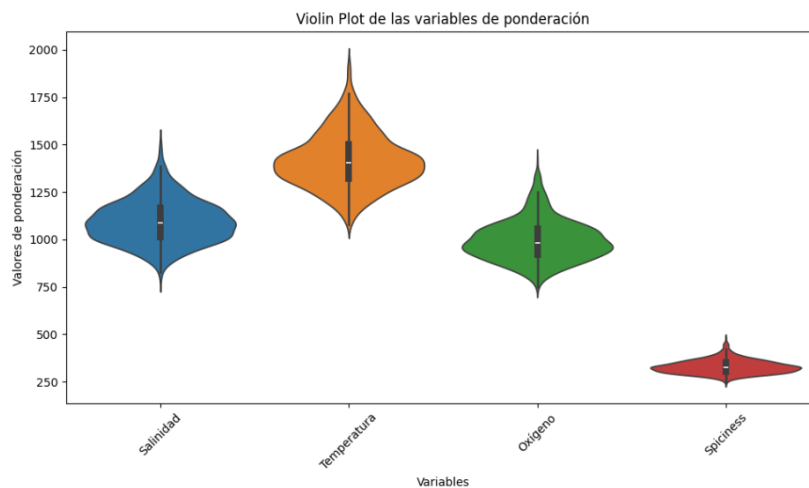


Figura 12. Distribución de los valores del vector de ponderación para las variables Salinidad, Temperatura, Oxígeno y Spiciness, visualizada mediante diagramas de violín. Estos diagramas ilustran la densidad de probabilidad de los pesos asignados a cada parámetro en el modelo OMPA, revelando la forma y dispersión de sus distribuciones durante el proceso de optimización.

En general, se observa que los pesos de la salinidad, temperatura y oxígeno disuelto son notablemente mayores que los de la *spiciness*, lo que sugiere que el modelo prioriza los parámetros con un mayor contraste o relevancia en la caracterización de las mezclas de masas de agua. Específicamente, los valores medianos de ponderación para la temperatura son los más altos, alrededor de 1500, extendiéndose su distribución hasta aproximadamente 2000. La salinidad presenta valores medianos ligeramente inferiores, en torno a 1150, mientras que la concentración de oxígeno tiene una mediana cercana a 1000. En contraste, la *spiciness* muestra una ponderación significativamente menor, con su mediana alrededor de 350.

En cuanto a la forma de las distribuciones (**Fig. 12**), los *violin plots* revelan que la salinidad y la temperatura exhiben distribuciones de ponderación notablemente simétricas y centradas, indicando una consistencia en la influencia de estos parámetros. Por el contrario, la distribución del oxígeno muestra una ligera asimetría hacia valores más bajos, lo que refleja una mayor frecuencia de ponderaciones menores. La *spiciness* presenta el sesgo más marcado, con una clara concentración de pesos hacia valores inferiores.

5. Discusión de resultados

5.1 Comparación con estudios previos

La validación de la herramienta desarrollada en este trabajo se ha realizado mediante la comparación de los resultados obtenidos en la campaña TRANSMOW con los datos de referencia proporcionados por el proyecto GEOVIDE (2014), el cual aplicó un análisis multiparamétrico extendido (eOMP) en el Atlántico Norte subpolar. El estudio de García-Ibáñez et al. (2018) ha sido elegido como referencia comparativa para la validación de nuestra herramienta computacional, dado que emplea el método OMPA sobre un conjunto de datos bien documentado y geográficamente coincidente con la región de estudio de TRANSMOW.

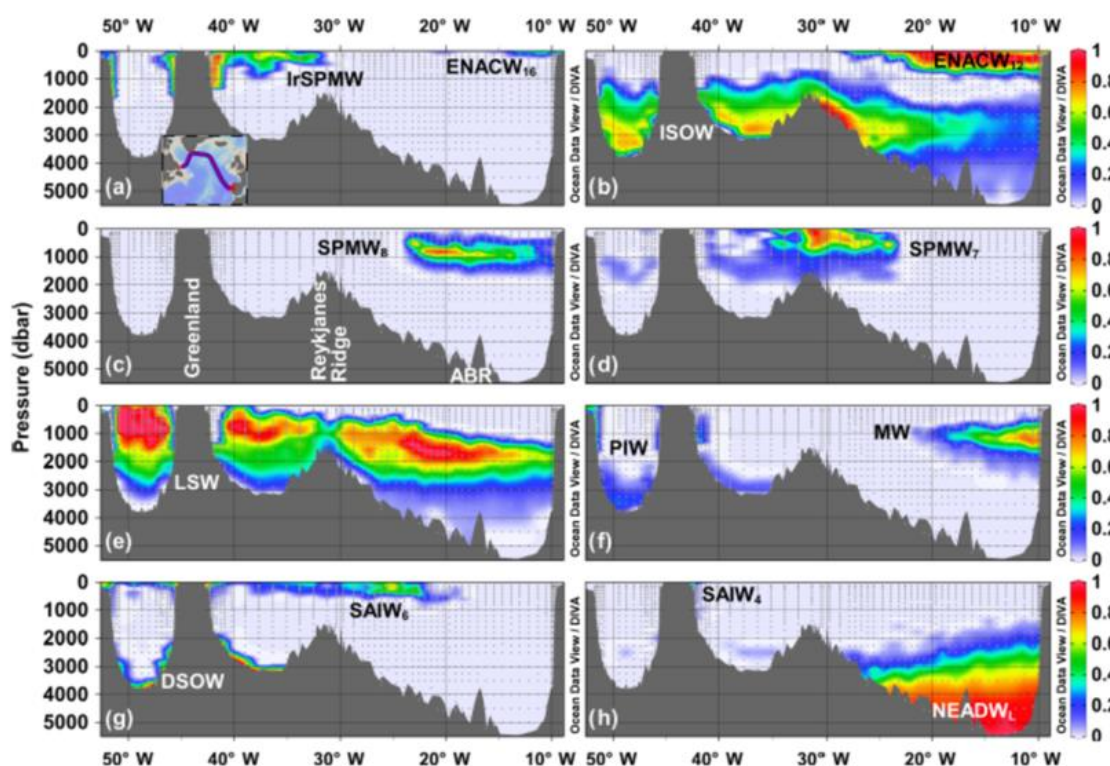


Figura 13. Distribución de masas de agua resultante del análisis eOMP para la campaña GEOVIDE de 2014 (sección GEOTRACES-GA01, recuadro en el subgráfico a), desde Portugal (derecha) hasta Canadá (izquierda). Las localizaciones de las muestras aparecen como puntos grises. ABR se refiere a la Dorsal Azores-Biscay. De García-Ibáñez et al. (2018).

En términos generales, el modelo reproduce de manera consistente la distribución vertical esperada de las masas de agua en la zona, reflejando una separación adecuada entre orígenes subtropicales, mediterráneos y subpolares. Esta coherencia es especialmente destacable en la región superficial e intermedia, donde las contribuciones de ENACW16, ENACW12 y MW son consistentes con las observaciones del proyecto GEOVIDE en la misma franja latitudinal (**Fig. 13**). La ENACW domina en los primeros 500 metros del transecto, mientras que la MW se manifiesta como una masa intermedia salina entre 1000 y 1500 metros, en patrones comparables a los observados por GEOVIDE (**Fig. 9; Fig. 13**).

Sin embargo, en las capas más profundas se identifican discrepancias relevantes respecto a la bibliografía. La superposición parcial entre la LSW y la NEADWu es evidente (**Fig. 9d; 9e**). Esta incertidumbre se corrobora con la presencia de anomalías claras en las secciones de desviación estándar (**Fig. 11d; 11e**), donde se alcanzan valores cercanos al 50% en múltiples tramos de profundidad tanto para la LSW como para la NEADWu. La ausencia de una señal robusta para la LSW en las profundidades esperadas según la literatura (**Fig. 13**), sumada a estas altas desviaciones estándar, apoya la hipótesis de que el modelo OMPA presenta limitaciones en su correcta asignación de estas masas de agua.

La superposición observada entre la LSW y la NEADWu, particularmente entre los 1500 y 3000 m de profundidad, puede atribuirse a dos factores principales: la ausencia de procesos de mezcla reales entre las masas de agua tipo escogidas para la región de estudio y/o una limitación del OMPA para diferencia de forma precisa estas masas de agua.

Para evaluar si la superposición observada entre LSW y NEADWu se debe efectivamente a similitudes físico-químicas o, alternativamente, a la ausencia real de LSW o NEADW en la región de estudio, se elaboró una representación tridimensional (Salinidad, Temperatura y Oxígeno disuelto) de las muestras hidrográficas recolectadas durante la campaña TRANSMOW (**Fig. 14**). La distribución de los puntos en el espacio T-S-Ox revela que la mayoría de las muestras se agrupan en torno a los *endmembers* ENACW12, ENACW16, MW y NEADWu, lo que indica coherencia entre las observaciones y las propiedades físico-químicas asignadas a estas masas de agua. Sin embargo, el LSW aparece claramente desplazado con respecto al núcleo principal del conjunto de datos (**Fig. 14a; 14b**).

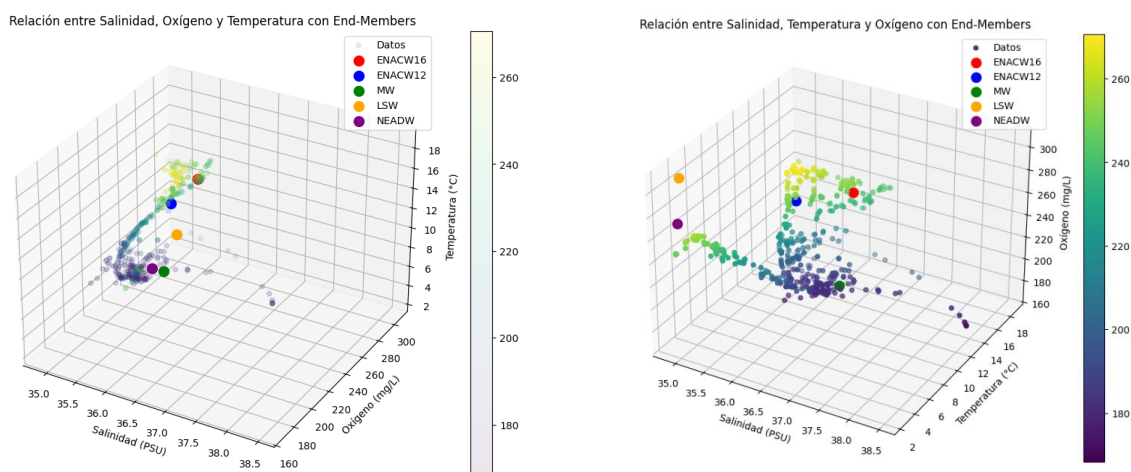


Figura 14. Representación tridimensional de las muestras hidrográficas de la campaña TRANSMOW (puntos coloreados) y la ubicación de los *endmembers* seleccionados (esferas grandes) en el espacio definido por Salinidad (PSU), Temperatura (°C) y Oxígeno disuelto ($\mu\text{mol/kg}$). Las subfiguras (a) y (b) presentan la misma distribución desde diferentes ángulos para facilitar la visualización de la separación entre las masas de agua (ENACW16, ENACW12, MW, LSW y NEADWu) en el espacio de trazadores

Si observamos detalladamente la trayectoria de los puntos de las muestras a medida que aumenta la profundidad (**Fig. 14a; 14b**) demuestra que estos se desplazan consistentemente hacia las propiedades del NEADWu, sin evidencia de una concentración significativa hacia el LSW. Es decir, los puntos se orientan de forma clara y predominante hacia el NEADWu, sin mostrar trayectorias intermedias hacia el LSW, las cuales se habrían manifestado como una tendencia hacia valores más bajos

en el eje de oxígeno disuelto. Esta clara separación direccional apoya la hipótesis de que la contribución efectiva del LSW a la mezcla en la región analizada podría ser menor o incluso insignificante en comparación con otras masas de agua, lo que justificaría la dificultad del modelo para asignarla.

Sin embargo, las secciones verticales de García Ibañez (**Fig. 14**) evidencian que las masas de agua más representativas en nuestra área de estudio son precisamente las seleccionadas para el análisis (ENACW, MW, LSW, NEADWu). En consecuencia, la problemática de superposición observada entre la LSW y la NEADWu no parece atribuirse a una selección incorrecta de las masas de agua fuente.

Esto indica que el modelo OMPA presenta una dificultad específica a la hora de diferenciar entre estas dos masas profundas. Una posible explicación a esta dificultad radica en las limitaciones de resolución del modelo OMPA cuando se trabaja con un número reducido de trazadores fisicoquímicos (en este caso, cuatro). Una mayor cantidad de parámetros o la selección de otros trazadores más distintivos podría mejorar significativamente la capacidad del algoritmo para discriminar entre masas de agua con propiedades termohalinas muy similares.

Al respecto, los resultados de García Ibañez et al. (2018) que otras masas de agua que no consideramos, como la ISOW (con contribuciones de hasta ~20% desde los 2000 m de profundidad) o la SPMW8 (con contribuciones de hasta ~20% entre 200 y 1500 m) pueden alcanzar el margen ibérico (**Fig. 13**). La inclusión de un mayor número de trazadores, similar a los utilizados por García Ibañez et al. (2018), permitiría aumentar el número de *endmembers* incorporados al OMPA (dada la restricción M-1). Esto posibilitaría la inclusión de masas de agua adicionales como la ISOW o la SPMW8, y la posterior comparación para determinar si dicha ampliación mejoraría la resolución y precisión de los resultados obtenidos en este análisis.

Además, la priorización de los trazadores más contrastantes (véase apartado anterior) (**Fig. 12**) puede haber contribuido a enmascarar las diferencias más sutiles entre LSW y NEADWu, ya que el LSW se caracteriza, precisamente, por su alto contenido en oxígeno disuelto, un rasgo distintivo que puede quedar infrarrepresentado en la solución final del modelo. Asimismo, la spiciness, parámetro que podría contribuir también a diferenciar mejor la LSW de la NEADWu, mostró una influencia relativamente marginal en el proceso de optimización del modelo OMPA (**Fig. 12**). Esta situación refuerza la hipótesis de que el LSW podría estar presente de forma activa en nuestras muestras, pero la herramienta no logra diferenciarla adecuadamente de la NEADWu debido a la escasa ponderación asignada a los trazadores que distinguen estas masas de agua. Como consecuencia, ambas masas tienden a ser agrupadas dentro de una solución común, comprometiendo la resolución del modelo en condiciones donde coexisten en proporciones similares o reducidas.

A pesar de las dificultades observadas en la diferenciación de ciertas masas de agua profundas, uno de los principales puntos fuertes del enfoque propuesto es, precisamente, su capacidad para detectar y reflejar estas situaciones de ambigüedad. A diferencia del OMPA clásico, donde una señal poco consistente de un *endmember* puede pasar desapercibida o ser interpretada erróneamente como una contribución variable, la implementación basada en simulaciones de Monte Carlo permite identificar con claridad estas incertidumbres a través de la elevada dispersión asociada a su asignación. Así, el modelo no solo calcula las proporciones de mezcla, sino que también informa sobre la solidez de cada resultado. En casos como el de la LSW, donde la señal es débil o se solapa con otras masas, el modelo refleja esta

complejidad mediante desviaciones estándar significativamente altas, alertando al usuario sobre una baja representatividad o diferenciación poco precisa. De este modo, se ofrece una evaluación más transparente, rigurosa y confiable del sistema de mezcla.

5.2 Limitaciones del método y posibles fuentes de error

En su estado de desarrollo incipiente actual, la herramienta ha revelado algunas limitaciones asociadas tanto al método OMPA como a su implementación específica. La más relevante ha sido la dificultad del modelo para distinguir entre masas de agua con propiedades físico-químicas muy similares. Este problema se ha evidenciado en la superposición entre el LSW y el NEADWu, cuyas firmas en el espacio T-S y en los vectores de trazadores pueden ser difíciles de separar, especialmente cuando se priorizan variables como la temperatura y la salinidad en la ponderación por encima de otros parámetros potencialmente más discriminantes, como el oxígeno disuelto o la spiciness (**Fig. 12**).

Además, el método asume que los trazadores seleccionados se comportan de forma estrictamente conservativa, lo cual no siempre es cierto, especialmente en zonas donde pueden ocurrir procesos biogeoquímicos que alteren las concentraciones de oxígeno disuelto. Esta suposición puede introducir errores sistemáticos en la estimación de las fracciones de mezcla, particularmente en capas superficiales o en zonas de fuerte actividad biológica.

Por último, otra limitación importante es la distribución vertical de las estaciones de muestreo disponibles en la campaña TRANSMOW. Mientras que en la capa intermedia y superior se cuenta con una alta densidad de perfiles, sólo una estación supera los 3000 metros de profundidad con solo tres estaciones en esta área. Esto genera un desequilibrio en la representatividad vertical de los datos, dificultando la validación del modelo en la capa profunda y en el fondo oceánico, donde la presencia de masas como la NEADWu podría no estar suficientemente bien caracterizada.

6. Conclusiones

El modelo OMPA-MC ha logrado reproducir patrones de mezcla coherentes con el conocimiento actual sobre la estructura hidrográfica de la región de estudio, mostrando una alta concordancia con estudios previos. Las estimaciones generadas son físicamente realistas, y una representación vertical coherente de las principales masas de agua.

La herramienta incorpora una componente estocástica tanto en la generación aleatoria de *endmembers* como en la asignación de incertidumbre instrumental, lo que rompe con el carácter determinista del OMPA clásico y permite representar de forma más realista la variabilidad del sistema.

La integración de simulaciones Monte Carlo ha dotado a la herramienta de una capacidad singular en la cuantificación la incertidumbre asociada a las soluciones, permitiendo evaluar con precisión la fiabilidad de los resultados. Esta capacidad ha resultado clave para identificar configuraciones inestables o no físicas, tal como ocurre en este caso con el Agua del Mar de Labrador (LSW), que presenta una alta dispersión en las estimaciones.

La herramienta también ha demostrado utilidad en la evaluación crítica de la idoneidad y representatividad de los *endmembers* seleccionados, permitiendo detectar posibles errores o limitaciones en su definición, lo cual representa un avance fundamental respecto al método tradicional.

En conjunto, los resultados obtenidos proporcionan un recurso analítico valioso para los oceanógrafos, proporcionando un marco sólido para la interpretación de procesos de mezcla y circulación en entornos complejos como el Atlántico nororiental. Asimismo, el modelo presenta un alto potencial de adaptabilidad a otras áreas de estudio y puede ser perfeccionado para optimizar su aplicabilidad y alcance.

7. Bibliografía

- Björk, Å. (1976). [Review of *Solving Least Squares Problems*, by C. L. Lawson & R. J. Hanson]. *Mathematics of Computation*, 30(135), 665–666. <https://doi.org/10.2307/2005340>.
- Brown, M. (1998). Ocean Data View 4.0. *Oceanography*, 11(2), 19–21. <http://www.jstor.org/stable/43925566>.
- Buil, M. P., Schroeder, I., Bograd, S. J., Jacox, M. G., Hazen, E. L., Deauna, D., Di Lorenzo, E., Lovenduski, N. S., Mogen, S., & Rykaczewski, R. R. (2025). On the sensitivity of Optimum Multiparameter Analysis: A California Current System case study. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, 105498. <https://doi.org/10.1016/j.dsr2.2025.105498>
- Caesar, L., McCarthy, G. D., Thornalley, D. J. R., Cahill, N., & Rahmstorf, S. (2021). Current Atlantic Meridional Overturning Circulation weakest in last millennium. *Nature Geoscience*, 14(3), 118–120. <https://doi.org/10.1038/s41561-021-00699-z>
- Daniault, N., Mercier, H., Lherminier, P., Sarafanov, A., Falina, A., Zunino, P., Pérez, F. F., Ríos, A. F., Ferron, B., Huck, T., Thierry, V., & Gladyshev, S. (2016). The northern North Atlantic Ocean mean circulation in the early 21st century. *Progress in Oceanography*, 146, 142–158. <https://doi.org/10.1016/j.pocean.2016.06.007>
- De Brauwere, A., Jacquet, S. H. M., De Ridder, F., Dehairs, F., Pintelon, R., Schoukens, J., & Baeyens, W. (2007). Water mass distributions in the Southern Ocean derived from a parametric analysis of mixing water masses. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 112(C2), 2006JC003742. <https://doi.org/10.1029/2006JC003742>
- Emery, W. J. (2001). Water Types And Water Masses. En *Encyclopedia of Ocean Sciences* (pp. 3179–3187). Elsevier. <https://doi.org/10.1006/rwos.2001.0108>
- Flament, P. (2002). A state variable for characterizing water masses and their diffusive stability: Spiciness. *Progress in Oceanography*, 54(1–4), 493–501. [https://doi.org/10.1016/S0079-6611\(02\)00065-4](https://doi.org/10.1016/S0079-6611(02)00065-4).
- García-Ibáñez, M. I., Pérez, F. F., Lherminier, P., Zunino, P., Mercier, H., & Tréguer, P. (2018). Water mass distributions and transports for the 2014 GEOVIDE cruise in the North Atlantic. *Biogeosciences*, 15(7), 2075–2090. <https://doi.org/10.5194/bg-15-2075-2018>
- García-Lafuente, J., Delgado, J., Criado-Aldeanueva, F., Bruno, M., Del Río, J., & Miguel Vargas, J. (2006). Water mass circulation on the continental shelf of the Gulf of Cádiz. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, 53(11–13), 1182–1197. <https://doi.org/10.1016/j.dsr2.2006.04.011>

- Glover, D. M., Jenkins, W. J., & Doney, S. C. (2011). *Modeling Methods for Marine Science* (1.^a ed.). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511975721>
- Groeskamp, S., Griffies, S. M., Iudicone, D., Marsh, R., Nurser, A. J. G., & Zika, J. D. (2019). The Water Mass Transformation Framework for Ocean Physics and Biogeochemistry. *Annual Review of Marine Science*, 11(1), 271-305. <https://doi.org/10.1146/annurev-marine-010318-095421>
- Haine, T. W. N., & Hall, T. M. (2002). A Generalized Transport Theory: Water-Mass Composition and Age. *Journal of Physical Oceanography*, 32(6), 1932-1946. [https://doi.org/10.1175/1520-0485\(2002\)032<1932:AGTTWM>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0485(2002)032<1932:AGTTWM>2.0.CO;2)
- Harrison, R. L., Granja, C., & Leroy, C. (2010). *Introduction to Monte Carlo Simulation*. 17-21. <https://doi.org/10.1063/1.3295638>
- IOC, SCOR, & IAPSO. (2010). *The international thermodynamic equation of seawater – 2010: Calculation and use of thermodynamic properties* (IOC Manuals and Guides No. 56). UNESCO. https://www.teos-10.org/pubs/TEOS-10_Manual.pdf
- Iskandarani, M., Wang, S., Srinivasan, A., Carlisle Thacker, W., Winokur, J., & Knio, O. M. (2016). An overview of uncertainty quantification techniques with application to oceanic and oil-spill simulations. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 121(4), 2789-2808. <https://doi.org/10.1002/2015JC011366>
- IPCC. (2023). *Climate Change 2023: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change* (Core Writing Team, H. Lee & J. Romero, Eds.). IPCC. <https://doi.org/10.59327/IPCC/AR6-9789291691647>
- Jackett, D. R., & McDougall, T. J. (1997). A Neutral Density Variable for the World's Oceans. *Journal of Physical Oceanography*, 27(2), 237-263. [https://doi.org/10.1175/1520-0485\(1997\)027<0237:ANDVFT>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0485(1997)027<0237:ANDVFT>2.0.CO;2)
- Jenkins, W. J., Smethie, W. M., Boyle, E. A., & Cutter, G. A. (2015). Water mass analysis for the U.S. GEOTRACES (GA03) North Atlantic sections. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, 116, 6-20. <https://doi.org/10.1016/j.dsr2.2014.11.018>
- Kluyver Thomas, Ragan-Kelley Benjamin, Pérez Fernando, Granger Brian, Bussonnier Matthias, Frederic Jonathan, Kelley Kyle, Hamrick Jessica, Grout Jason, Corlay Sylvain, Ivanov Paul, Avila Damián, Abdalla Safia, Willing Carol, & Jupyter Development Team. (2016). Jupyter Notebooks – a publishing format for reproducible computational workflows. En *Positioning and Power in Academic Publishing: Players, Agents and Agendas*. IOS Press. <https://doi.org/10.3233/978-1-61499-649-1-87>
- Lafuente, J. G., & Aldeanueva, F. C. (2001). La climatología y la topografía del Estrecho de Gibraltar determinantes de las propiedades termohalinas del agua del Mar Mediterráneo. *Física de la Tierra*.

- Lear, C. H., Rosenthal, Y., & Wright, J. D. (2003). The closing of a seaway: Ocean water masses and global climate change. *Earth and Planetary Science Letters*, 210(3-4), 425-436. [https://doi.org/10.1016/S0012-821X\(03\)00164-X](https://doi.org/10.1016/S0012-821X(03)00164-X)
- Lherminier, P., Mercier, H., Huck, T., Gourcuff, C., Perez, F. F., Morin, P., Sarafanov, A., & Falina, A. (2010). The Atlantic Meridional Overturning Circulation and the subpolar gyre observed at the A25-OVIDE section in June 2002 and 2004. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 57(11), 1374-1391. <https://doi.org/10.1016/j.dsr.2010.07.009>
- Liu, M., & Tanhua, T. (2021). Water masses in the Atlantic Ocean: Characteristics and distributions. *Ocean Science*, 17(2), 463-486. <https://doi.org/10.5194/os-17-463-2021>
- Pardo, P. C., Pérez, F. F., Velo, A., & Gilcoto, M. (2012). Water masses distribution in the Southern Ocean: Improvement of an extended OMP (eOMP) analysis. *Progress in Oceanography*, 103, 92-105. <https://doi.org/10.1016/j.pocean.2012.06.002>
- Pedregosa, F., Pedregosa, F., Varoquaux, G., Varoquaux, G., Org, N., Gramfort, A., Gramfort, A., Michel, V., Michel, V., Fr, L., Thirion, B., Thirion, B., Grisel, O., Grisel, O., Blondel, M., Prettenhofer, P., Prettenhofer, P., Weiss, R., Dubourg, V., ... Cournapeau, D. (s. f.). Scikit-learn: Machine Learning in Python. *MACHINE LEARNING IN PYTHON*.
- Peliz, Á., Dubert, J., Santos, A. M. P., Oliveira, P. B., & Le Cann, B. (2005). Winter upper ocean circulation in the Western Iberian Basin—Fronts, Eddies and Poleward Flows: An overview. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 52(4), 621-646. <https://doi.org/10.1016/j.dsr.2004.11.005>
- Pena, L. D., Campderrós, S., García-Solsona, E., Paredes-Paredes, E., Frigola, J., Rodríguez-Díaz, C. N., Lucas, A., Calvo, E., Pelejero, C., & Cacho, I. (2025, enero 20). *Geochemical characterization of Mediterranean Outflow Waters in the modern ocean: Nd isotopes, carbon cycle and new export constraints*. <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu24-16921>
- Poole, R., & Tomczak, M. (1999). Optimum multiparameter analysis of the water mass structure in the Atlantic Ocean thermocline. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 46(11), 1895-1921. [https://doi.org/10.1016/S0967-0637\(99\)00025-4](https://doi.org/10.1016/S0967-0637(99)00025-4)
- Racapé, V., Thierry, V., Mercier, H., y Cabanes, C. (2019). ISOW Spreading and Mixing as Revealed by Deep-Argo Floats Launched in the Charlie-Gibbs Fracture Zone. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 124(10), 6787-6808. <https://doi.org/10.1029/2019JC015040>
- Rahmstorf, S., Box, J. E., Feulner, G., Mann, M. E., Robinson, A., Rutherford, S., & Schaffernicht, E. J. (2015). Exceptional twentieth-century slowdown in Atlantic Ocean overturning circulation. *Nature Climate Change*, 5(5), 475-480. <https://doi.org/10.1038/nclimate2554>

- Roshan, S., & Wu, J. (2015). Water mass mixing: The dominant control on the zinc distribution in the North Atlantic Ocean. *Global Biogeochemical Cycles*, 29(7), 1060-1074. <https://doi.org/10.1002/2014GB005026>
- Schlitzer, R. (2023). *Ocean Data View* [Computer software]. <https://odv.awi.de>
- SciPy Developers. (2023). *scipy.optimize.nnls — SciPy v1.11.1 Manual*. SciPy.org. <https://docs.scipy.org/doc/scipy-1.11.1/reference/generated/scipy.optimize.nnls.html>
- Tomczak, M. (1999). Some historical, theoretical and applied aspects of quantitative water mass analysis. *Journal of Marine Research*, 57(2), 275-303. <https://doi.org/10.1357/002224099321618227>
- Tomczak, M., & Large, D. G. B. (1989). Optimum multiparameter analysis of mixing in the thermocline of the eastern Indian Ocean. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 94(C11), 16141-16149. <https://doi.org/10.1029/JC094iC11p16141>
- Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., Haberland, M., Reddy, T., Cournapeau, D., Burovski, E., Peterson, P., Weckesser, W., Bright, J., Van Der Walt, S. J., Brett, M., Wilson, J., Millman, K. J., Mayorov, N., Nelson, A. R. J., Jones, E., Kern, R., Larson, E., ... Vázquez-Baeza, Y. (2020). SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in Python. *Nature Methods*, 17(3), 261-272. <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>

