

SECCIÓN DE FÍSICA PRÁCTICAS EXTERNAS

Monitorización de la composición gaseosa atmosférica a través de la Espectrometría de Infrarrojo por Transformada de Fourier

Yazmina Zurita Martel

Tutorizadas por
Dra. Omaira García Rodríguez (AEMET)
Dr. Manuel Imeldo Arbelo Pérez (ULL)

Mayo 2020

Índice

1. Entidad colaboradora	3
2. Descripción de tareas y trabajos realizados	3
2.1. Objetivos	3
2.2. Características de los espectrómetros EM27 y HR125	3
2.3. Base de datos disponible	4
2.4. Colocación temporal y definición de magnitudes de comparación	6
2.5. Filtrado de concentraciones atípicas	6
2.5.1. Filtro basado en la distancia intercuartil	7
2.5.2. Filtro basado en las concentraciones de CO ₂	10
2.5.3. Filtro basado en la comparación de las dos series	11
2.6. Resumen de la comparativa	13
2.7. Análisis de la dependencia con la geometría de observación	16
2.8. Análisis de la dependencia con las concentraciones	19
2.9. Resumen y conclusiones	20
3. Valoración de los conocimientos y competencias adquiridos en relación con los estudios universitarios	21
4. Problemas planteados y procedimiento seguido para su resolución	22
5. Identificación de las aportaciones que han supuesto las prácticas en materia de aprendizaje	22
6. Autoevaluación de las prácticas	23
Referencias	24

1. Entidad colaboradora

El Centro de Investigación Atmosférica de Izaña (CIAI), de la Agencia Estatal de Meteorología (AEMET), desarrolla actividades de I+D que se enmarcan en el Programa de Vigilancia Atmosférica Global (VAG) de la Organización Meteorológica Mundial (OMM). Su principal objetivo es la vigilancia e investigación de los componentes atmosféricos capaces de propiciar un cambio en el clima de la Tierra (gases de efecto invernadero y aerosoles) y un deterioro de la capa de ozono mundial, así como el de aquellos componentes que juegan un papel fundamental en la calidad del aire, en particular los aerosoles atmosféricos. Esta misión la lleva a cabo bajo el amparo de la AEMET y como Unidad Asociada del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), bajo la denominación de "Grupo para el Estudio de la Contaminación Atmosférica".

Además, participa activamente en actividades de vigilancia e investigación de otras redes internacionales como BSRN, TCCON, NDACC, AERONET y MPLNET. Gestiona cuatro estaciones en la isla de Tenerife: el Observatorio Atmosférico de Izaña (IZO), de alta montaña, el Observatorio de Santa Cruz de Tenerife (SCO), a nivel del mar, y complementario del anterior, para la investigación de la calidad del aire urbana de fondo en la ciudad de Santa Cruz de Tenerife, y dos estaciones secundarias en el Pico del Teide (PTO) y en el Jardín Botánico (BTO) en el Puerto de la Cruz.

2. Descripción de tareas y trabajos realizados

2.1. Objetivos

El objetivo principal de estas Prácticas Externas ha sido comparar las medidas simultáneas de dos espectrómetros de infrarrojo por Transformada de Fourier (FTIR), de baja (EM27) y alta (HR125) resolución espectral, que operan en el Observatorio Atmosférico de Izaña (OAI), gestionado por el Centro de Investigación de Izaña (CIAI), dependiente de la Agencia Estatal de Meteorología (AEMET). En particular, se han comparado las concentraciones atmosféricas de los tres principales gases de efecto invernadero (GEIs), vapor de agua (H_2O), dióxido de carbono (CO_2) y metano (CH_4), estableciendo y analizando para ello una serie de magnitudes de comparación.

Este análisis también nos ha permitido detectar posibles inconsistencias instrumentales u originadas en el procesamiento de las observaciones, lo cual es fundamental para poder combinar las medidas de ambos conjuntos de datos.

2.2. Características de los espectrómetros EM27 y HR125

El EM27 y el HR125 son sistemas de teledetección pasivos que operan desde tierra. Están orientados hacia el Sol en todo momento y registran la radiación en el infrarrojo cercano emitida por éste tras atravesar la columna atmosférica. Por ello, son sensibles a la presencia de los diferentes componentes atmosféricos que absorban en el infrarrojo cercano.

El núcleo de estos dos instrumentos lo conforma un interferómetro. Este componente divide la radiación incidente en dos haces que recorren distancias ligeramente distintas antes de coincidir de nuevo, formando un patrón de interferencia dependiente de la diferencia de camino óptico (OPD)

que han recorrido los dos haces.

Una vez se obtiene el interferograma, que caracteriza la dependencia intensidad-OPD, se le aplica una Transformada de Fourier para pasar al dominio de frecuencias y obtener así el espectro de absorción solar directo. Esta transformada debe ser previamente discretizada, pues en la práctica el interferograma no es continuo, y debe ser convolucionada a su vez por la transformada de una función que de cuenta de la limitación del OPD máximo (generalmente una función rectangular).

Por último, los espectros de absorción medidos son post-analizados mediante un código de inversión, el cual simula la transferencia de la radiación solar infrarroja directa en la atmósfera basada en la Ley de Lambert-Beer. Mediante un proceso iterativo, este método de inversión permite obtener las concentraciones totales en la columna vertical atmosférica (VC) de los gases de interés. En este trabajo, se ha empleado el código de inversión PROFFAST, desarrollado por el Instituto de Tecnología de Karlsruhe (KIT, Alemania) [Frey et al., 2019].

Actualmente, existe un gran interés en la comunidad científica internacional en el estudio y desarrollo del EM27 como alternativa al HR125, pues se trata de un sistema móvil, más pequeño y económico, que a pesar de tener menor resolución espectral (0.5 cm^{-1} frente a 0.02 cm^{-1} del HR125) puede llegar a ser igual de preciso en la medida de GEIs.

2.3. Base de datos disponible

Para reducir el efecto de posibles errores instrumentales en las observaciones de estos sistemas, las columnas atmosféricas son tradicionalmente convertidas a sus correspondientes fracciones molares en aire seco (denotadas como X_{gas}). Para ello, se toma como referencia la VC de un gas estable y "bien conocido", también invertido a partir de los espectros de absorción solar medidos por los espectrómetros FTIR. En el caso del infrarrojo cercano, el gas de referencia empleado es el oxígeno (O_2).

$$X_{gas} = \frac{VC_{gas}}{VC_{aireseco}} = \frac{VC_{gas}}{VC_{O_2}} * 0,2095$$

En este trabajo se emplearán las observaciones de XCO_2 , XCH_4 y XH_2O tomadas entre julio de 2018 y febrero de 2020 por ambos instrumentos (Figura 1). La Tabla 1 muestra un resumen de los días y medidas disponibles durante este periodo. Nótese que el 10 de diciembre de 2019 se efectúa un cambio en la versión del código de inversión utilizado en los datos del EM27, pasando de la v_1 a la v_2 y coincidiendo a partir de esa fecha con la empleada con el HR125.

Para invertir las concentraciones de los gases, se ha empleado la región del espectro solar correspondiente a $8353.40 - 8463.10 \text{ cm}^{-1}$ para el H_2O , $6173.00 - 6390.00 \text{ cm}^{-1}$ para el CO_2 y $5897.00 - 6145.00 \text{ cm}^{-1}$ para el CH_4 .

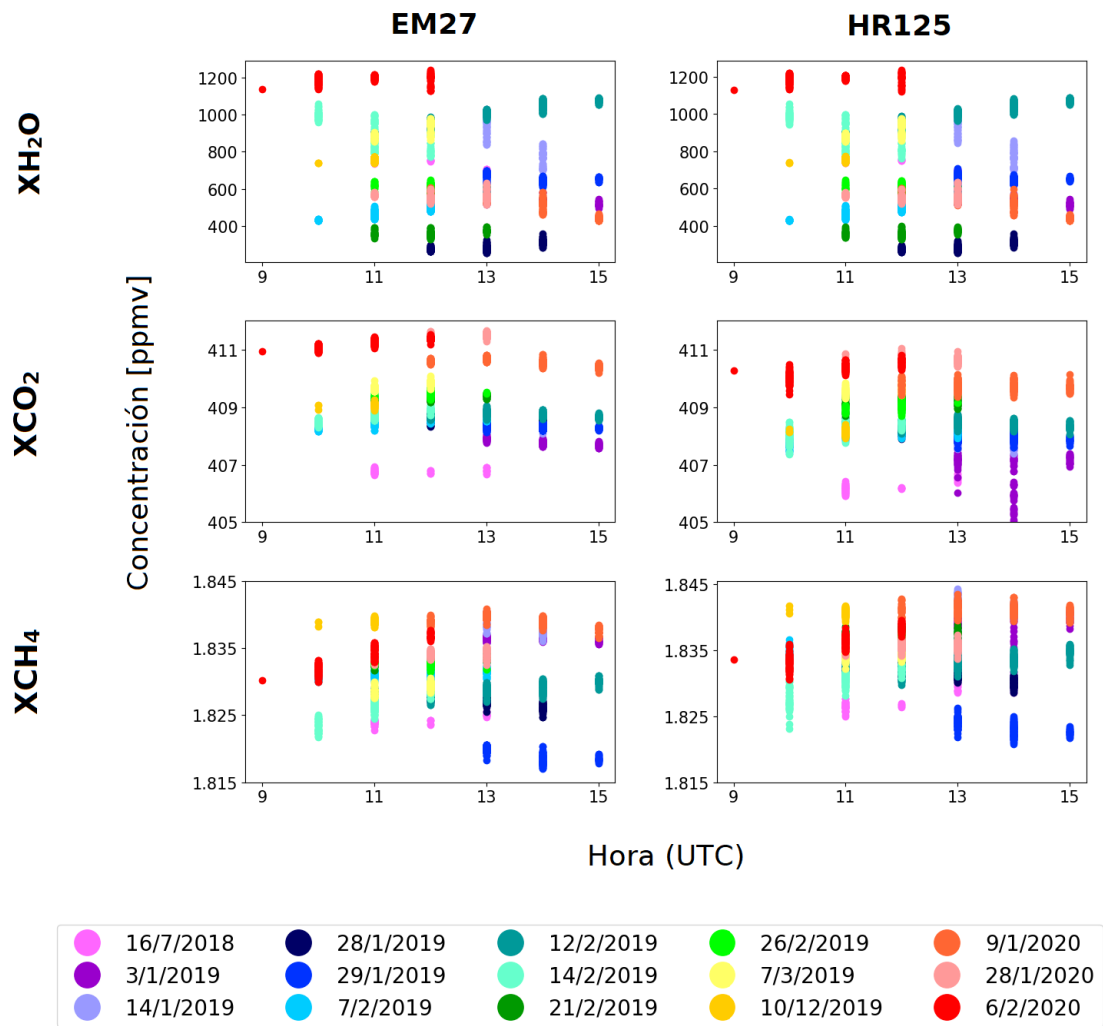


Figura 1: Concentraciones de H_2O , CO_2 y CH_4 tomadas por el EM27 y el HR125 frente a la hora en que fueron registradas (UTC). Los diferentes días se señalan en colores.

Instr.		Días		Número de medidas	
		tot.	intercep.	tot.	intercep.
EM27	v_1	11	11	3555	1628
	v_2	4	4	1620	662
HR125		19	15	2636	2290

Tabla 1: Número de días de observación y medidas disponibles por instrumento y versión antes y después de interceptar las bases de datos, según la sección 2.4.

2.4. Colocación temporal y definición de magnitudes de comparación

Para realizar una intercomparación entre las observaciones del EM27 y el HR125 debemos asociar las medidas de ambos instrumentos, de forma que las condiciones atmosféricas bajo las que se han tomado sean lo más parecidas posibles. Los datos del EM27 tienen una frecuencia temporal de aproximadamente un minuto, mientras que los datos del HR125 se adquieren a una frecuencia ligeramente mayor. Por tanto, establecemos una diferencia máxima de tiempo entre las dos bases de datos de un minuto. Así el procedimiento para interceptar las bases consistirá en tomar cada medida del HR125 y tratar de asociarla con una del EM27 que diste 60s o menos.

Esto se ha conseguido para todos los días de medida del HR125 excepto para el 27 y 28 de febrero y el 28 y 29 de octubre de 2019, donde no existen medidas del EM27 en el OAI, sino en las dependencias del CIAI en Santa Cruz de Tenerife.

Una vez se han interceptado las bases, se pueden calcular fácilmente magnitudes de comparación aplicadas a cada par de medidas. En este estudio, se considerarán:

- El factor de escala:

$$FC = \frac{EM27^i}{HR125^i}$$

- La diferencia absoluta:

$$\Delta_a = EM27^i - HR125^i$$

- La diferencia porcentual:

$$\Delta_{\%} = \frac{100 * (EM27^i - HR125^i)}{HR125^i}$$

2.5. Filtrado de concentraciones atípicas

Esta sección explora el uso de diferentes filtros para identificar las concentraciones atípicas o no esperables, provocadas por ejemplo por errores instrumentales, reducción de la radiación directa debido a nubes, etc.

El primer filtro está basado en la distancia intercuartil de la serie, desechando aquellas medidas superiores o inferiores a un cierto múltiplo de esta distancia. Dada la estabilidad espacio-temporal del CO_2 , las concentraciones de CO_2 atípicas detectadas por el primer filtro se utilizarán en un segundo filtro para desechar concentraciones de H_2O y CH_4 que hubieran sido tomadas de manera simultánea a las anteriores. El tercer filtro consiste en la aplicación del filtro basado en la distancia intercuartil sobre las magnitudes de comparación de los instrumentos. Los valores atípicos de estas magnitudes serán desechados en las respectivas series de concentraciones de los gases. Nótese que los tres filtros se han aplicado sobre la serie de cada gas en la base de datos interceptada.

2.5.1. Filtro basado en la distancia intercuartil

El primer filtro se basa en analizar la distribución de las concentraciones de cada gas medidas por cada instrumento, identificando los valores atípicos presentes en cada serie de forma independiente. Para ello, sumamos al tercer cuartil Q_3 de la distribución y restamos al primer cuartil Q_1 , k veces la distancia entre ambos, con el fin de establecer un límite superior e inferior a partir de los cuales se considerarán los valores atípicos q 's.

$$q < Q_1 - k(Q_3 - Q_1) \quad o \quad q > Q_3 + k(Q_3 - Q_1)$$

Se asigna un valor de k igual a 1,5 para valores atípicos leves e igual a 3 para extremos.

Los resultados se muestran en el Tabla 2, mientras que la figura 2 representa las distribuciones de frecuencia para las concentraciones tomadas por el HR125, como ejemplo.

Espectrómetro	k	XH_2O	XCO_2	XCH_4
EM27	1.5	0	0	0.39 % (9)
HR125		0	0.52 % (12)	3.80 % (87)
EM27	3	0	0	0
HR125		0	0	0

Tabla 2: Porcentajes de observaciones filtradas por espectrómetro y valor k del filtro para cada gas. Entre paréntesis se muestra el número total de medidas excluidas.

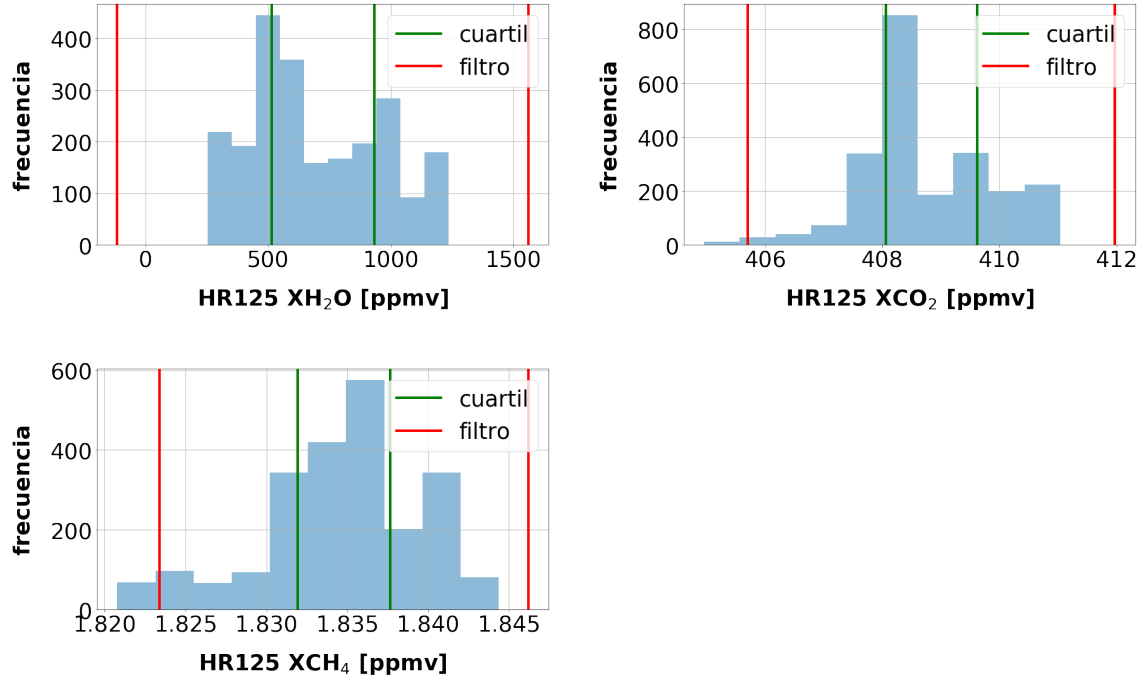


Figura 2: Distribución de medidas del HR125.

El H₂O posee fuentes y sumideros muy activos en la atmósfera, por lo que es muy variable espacial y temporalmente. Esto se traduce en una distancia intercuartil absoluta alta, empujando los límites lejos de la distribución observada y, por tanto, el filtro aplicado no filtra ninguna observación (ver Figura 2). Para este gas, podría ser más adecuado aplicar el filtro sobre las variaciones de las concentraciones relativas a un valor de fondo de la distribución de concentraciones.

Es ampliamente reconocido que las concentraciones atmosféricas de CO₂ y CH₄, a diferencia del vapor de agua, han aumentado desde la era pre-industrial, siendo ampliamente responsables del calentamiento global observado [Stocker et al., 2013]. Particularmente para OAI, la tasa de incremento anual de estos gases es de ~ 2 ppmv/año y ~ 0.005 ppmv/año para XCO₂ y XCH₄, respectivamente. Este incremento temporal, junto al comportamiento estacional de ambos gases, puede provocar que si la base de datos no está centrada en el tiempo, dará lugar a distribuciones asimétricas como se observan en la Figura 2. Este comportamiento compromete la precisión/eficacia del filtro, dado que está diseñado para distribuciones principalmente gaussianas. Como vemos para el XCH₄, el filtro basado en la distancia intercuartil identifica un número considerable de observaciones para valores bajos como valores atípicos, que pueden ser reales.

Para comprobar la validez del filtro se analizan las series temporales de las concentraciones medidas por ambos instrumentos e interceptadas, destacando los datos filtrados (Figura 3). Dado que las medidas no corresponden a días consecutivos, para una mejor interpretación, se representan en la Figura 3 y las serie de medidas frente a su posición consecutiva en la serie de datos interceptada. Nótese que las series están ordenadas cronológicamente, por lo que los primeros índices

corresponden al día 16/07/2018 y los últimos al día 06/02/2020.

En el caso del CO_2 , dado que es muy estable en la atmósfera, el filtro identifica valores atípicos presumiblemente correctos. Para las mismas observaciones en el CH_4 , se observan también unos datos que parecen alejarse del comportamiento del resto, pero que el filtro intercuartil no ha detectado. Sin embargo, sí identifica un conjunto de medidas, relativamente bajas respecto al resto de la serie, que parecen ser reales puesto que ambos instrumentos observan de forma similar la misma evolución. Por tanto, este filtro no parece ser adecuado para nuestras series de datos.

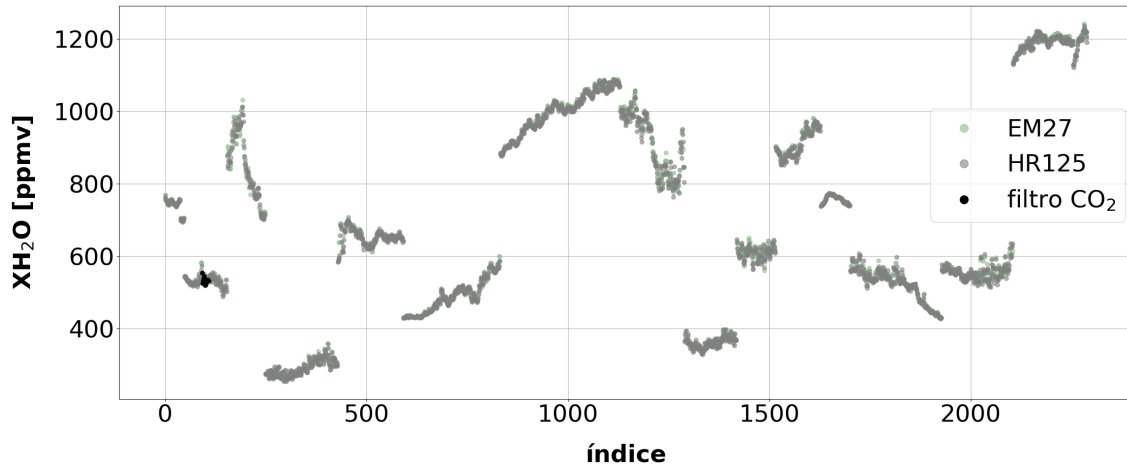


Figura 3a: Concentraciones del H_2O medidas por el HR125 y EM27 en función de su posición en la serie de datos. Se identifican los casos filtrados por el filtro de la distancia intercuartil (“filtro propio”) y el filtro basado en las concentraciones de CO_2 (“filtro CO_2 ”), según la sección 2.5.2.

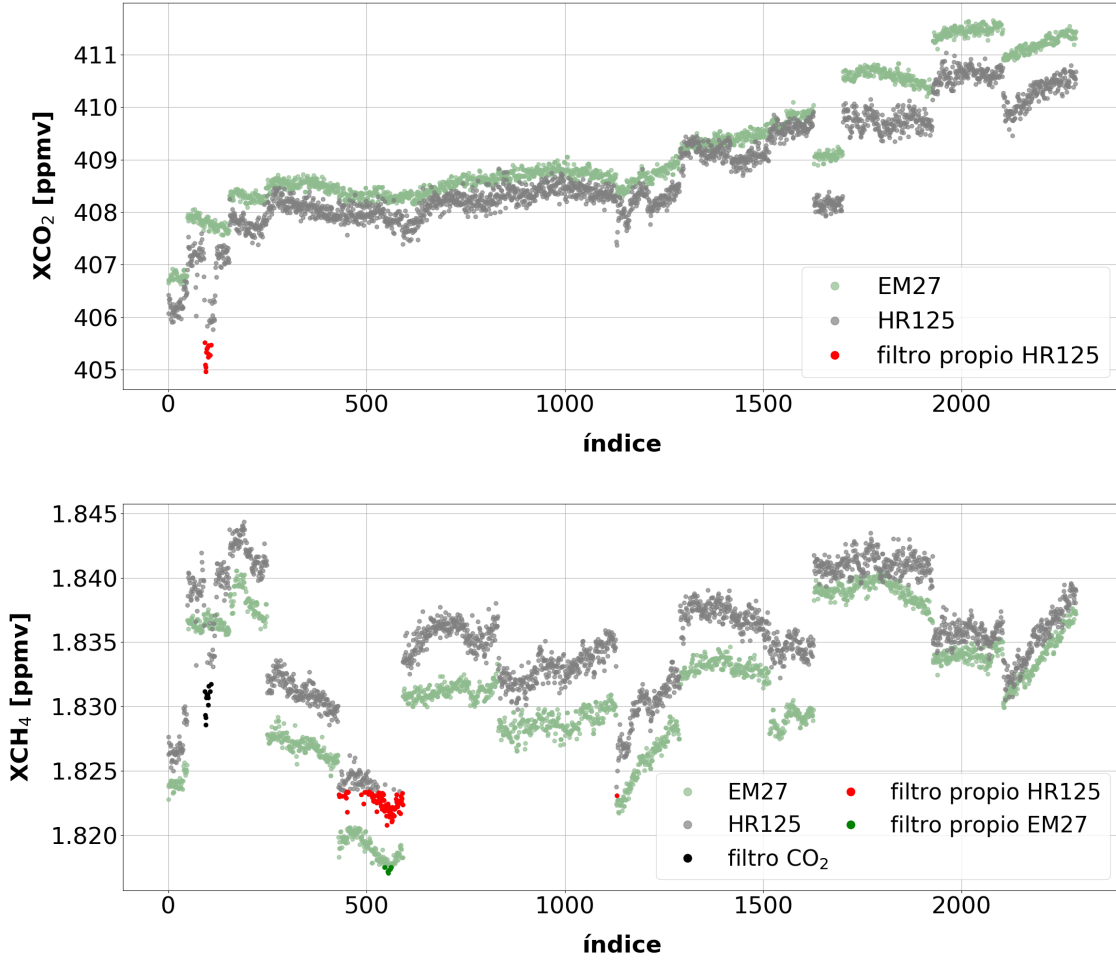


Figura 3b: Concentraciones del CO₂ y CH₄ medidas por el HR125 y EM27 en función de su posición en la serie de datos. Se identifican los casos filtrados por el filtro de la distancia intercuartil “filtro propio” y el filtro basado en las concentraciones de CO₂ (“filtro CO₂”), según la sección 2.5.2.

2.5.2. Filtro basado en las concentraciones de CO₂

Las concentraciones de CO₂ registradas en el OAI muestran gran estabilidad en escalas temporales cortas (i.e. dentro de un día o en días próximos), ya que no existen fuentes cercanos al observatorio, además de una tendencia de crecimiento claramente lineal con el tiempo. Estas características, a pesar de su distribución asimétrica, permitió un filtrado correcto de los valores atípicos empleando el filtro de la distancia intercuartil.

Por tanto, un método complementario al anterior consistiría en emplear los valores atípicos detectados en el CO₂ para filtrar el resto de gases, lo cual podría ser útil cuando no se cuenta con otro conjunto de datos de referencia. Como vemos en la Figura 3, donde se han incluido también

los casos filtrados empleando “el filtro de CO_2 ”, este filtro se muestra válido para tanto el CO_2 y CH_4 , dado que son gases que presentan distribuciones espaciales y temporales similares en la atmósfera aunque no compartan las fuentes de emisión. Sin embargo, en el caso del H_2O , filtra valores presumiblemente reales, por lo que no sería completamente válido.

2.5.3. Filtro basado en la comparación de las dos series

Al disponer de datos simultáneos de dos instrumentos similares, se pueden contrastar las medidas de ambos instrumentos mediante las magnitudes de comparación definidas en la sección 2.4. Así, aplicando el filtro basado en la distancia intercuartil (sección 2.5.1) directamente sobre los factores de escala y diferencias absolutas y relativas de cada gas se obtienen los resultados del Tabla 3. Además, la Figura 4 muestra como ejemplo la serie temporal de los factores de escalado para cada gas, donde se han destacado tanto los valores atípicos detectados por este filtro como aquellos empleando el filtro de CO_2 .

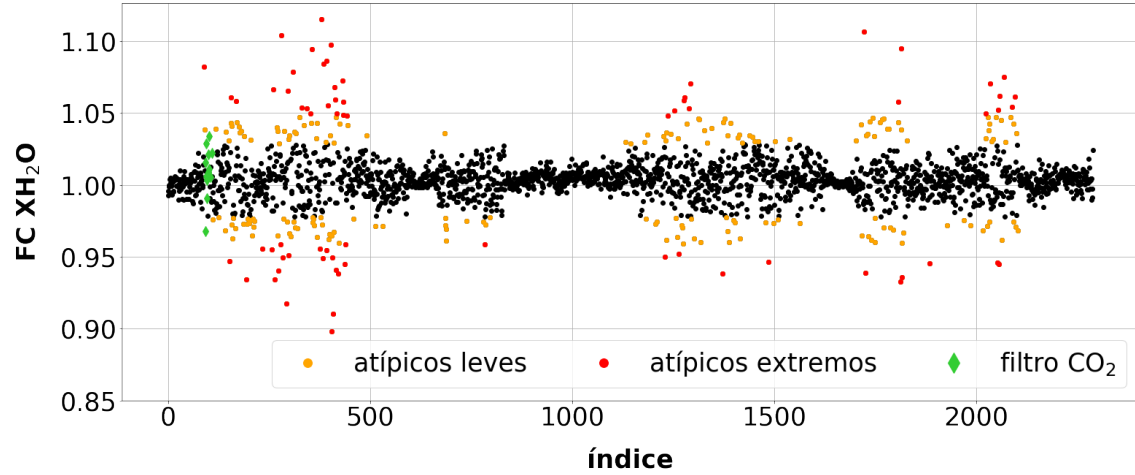


Figura 4a: Factor de escala del H_2O en función de su posición en la serie de datos. Se muestran los valores atípicos detectados por el filtro intercuartil sobre esta serie (en naranja los valores leves y en rojo los extremos) y los detectados por el filtro de CO_2 (en verde). La línea vertical azul separa los datos obtenidos por la versión $v1$ y $v2$ del código de inversión.

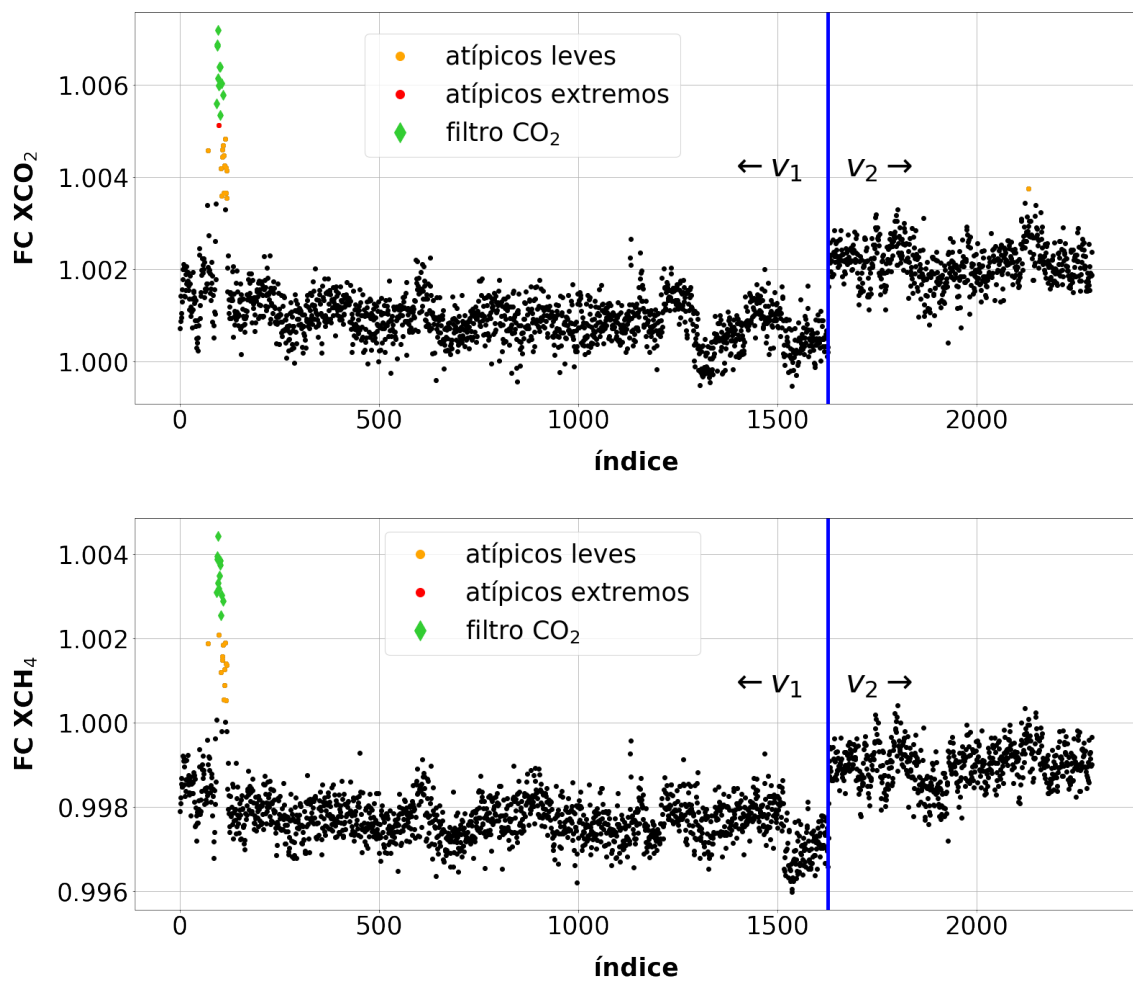


Figura 4b: Factor de escala del CO₂ y CH₄ en función de su posición en la serie de datos. Se muestran los valores atípicos detectados por el filtro intercuartil sobre esta serie (en naranja los valores leves y en rojo los extremos) y los detectados por el filtro de CO₂ (en verde). La línea vertical azul separa los datos obtenidos por la versión *v1* y *v2* del código de inversión.

Gas	k	Factor de escala	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual
H ₂ O	1.5	10.9 % (250)	7.56 % (174)	10.9 % (250)
CO ₂		1.22 % (28t)	1.22 % (28)	1.22 % (28)
CH ₄		1.09 % (25)	1.09 % (25)	1.09 % (25)
H ₂ O	3	3.06 % (70)	1.66 % (38)	3.06 % (70)
CO ₂		0.57 % (13)	0.52 % (12)	0.57 % (13)
CH ₄		0.52 % (12)	0.52 % (12)	0.52 % (12)

Tabla 3: Porcentajes de filtrado por magnitud de comparación y valor k del filtro para cada gas. Entre paréntesis se muestra el número total de medidas excluidas.

En primer lugar, hay que destacar que en la Figura 4 se observa claramente un salto en la serie temporal entorno al índice 1600 (que corresponde al 10/12/2019), el cual es debido al cambio de versión del código de inversión del EM27. Los procedimientos de filtrado realizados hasta ahora no se han visto afectados por este hecho, por lo que en esta sección se han tratado también de forma conjunta.

Se observa que en el caso del CO₂ y CH₄ el filtro de CO₂ detectaría correctamente valores atípicos extremos, pero no los leves y, como se comentó anteriormente para el H₂O, no sería adecuado para este gas dado que filtraría medidas presumiblemente correctas.

Se comprueba, por tanto, que el “filtro propio, basado en el análisis de cada serie independientemente, es menos eficiente que el ”filtro de CO₂”, y éste a su vez menos eficiente que aplicar el filtro intercuartil a las magnitudes de comparación directamente. Por tanto, para el resto del estudio, se retirarán los índices detectados por este último filtro y se trabajará con la base de datos resultante.

2.6. Resumen de la comparativa

La Figura 5 representa las concentraciones medidas por el EM27 frente a las concentraciones del HR125, que tomamos como instrumento de referencia, donde se han incluido dos ajustes de regresión lineal sobre los datos: el resultado de un ajuste por mínimos cuadrados (“best fit”) y otro forzando el paso por el origen (“intercept (0,0)”). Los parámetros de los dos ajustes lineales se muestran en la Tabla 4, así como la bondad de los mismos, dada por el coeficiente de determinación del ajuste (R^2).

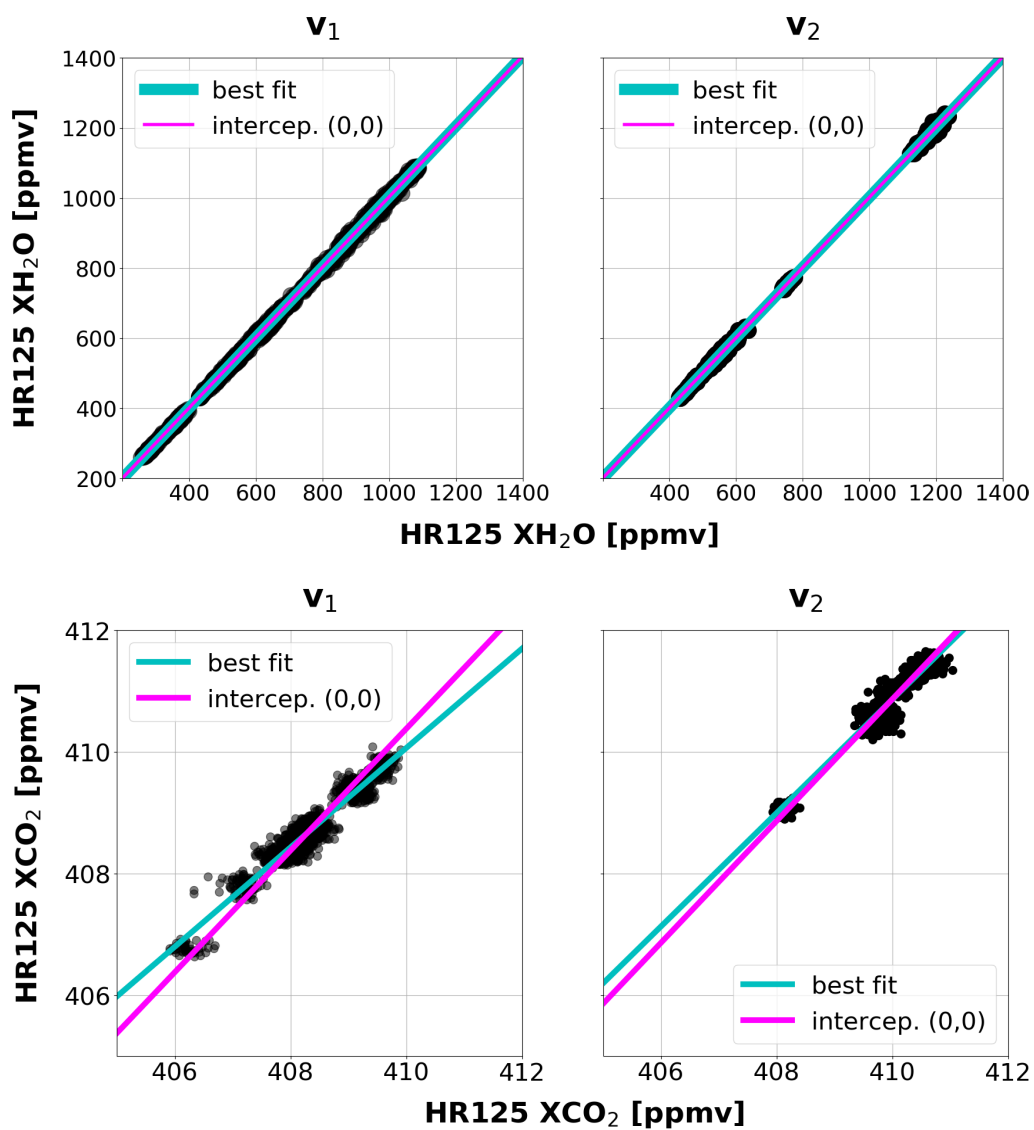


Figura 5a: Diagrama de dispersión de las concentraciones de H₂O y CO₂ medidas por el EM27 y el HR125. Se muestra en cian el ajuste por mínimos cuadrados ("best fit") y en magenta el ajuste con paso por el origen (intercept (0,0)).

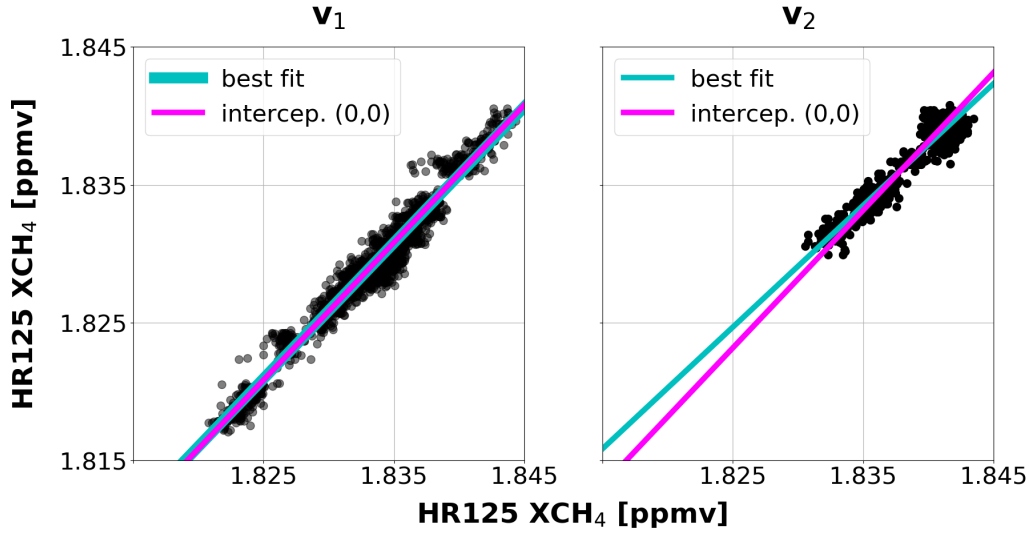


Figura 5b: Diagrama de dispersión de las concentraciones de CH_4 medidas por el EM27 y el HR125. Se muestra en cian el ajuste por mínimos cuadrados ("best fit") y en magenta el ajuste con paso por el origen (intercept (0,0)).

Gas		Pendiente		Ordenada en el origen (best fit)	Coeficiente Determinación (R^2)	
		intercep. (0,0)	best fit		intercep. (0,0)	best fit
H_2O	v_1	1.0040	1.0057	-1.3100	0.998	0.998
	v_2	1.0024	1.0030	-0.4998	0.998	0.998
CO_2	v_1	1.0009	0.8173	75.0	0.876	0.923
	v_2	1.0021	0.9342	27.9	0.937	0.940
CH_4	v_1	0.9977	0.9860	0.0215	0.958	0.958
	v_2	0.9990	0.8832	0.2129	0.897	0.912

Tabla 4: Resumen de los ajustes por mínimos cuadrados ("best fit") y con paso por el origen ("intercept (0,0)"). Se muestra la pendiente, la ordenada en el origen para el "best fit" y el coeficiente de determinación de ambos ajustes para los tres gases y las dos versiones del código de inversión v_1 y v_2 .

Teóricamente, las concentraciones de ambos instrumentos deberían ser idénticas y, por tanto, la relación entre estos conjuntos de datos daría lugar a una recta de pendiente 1 y ordenada en el origen 0 ("intercept (0,0)"). Si bien, como se muestra en la Figura 5 y en la Tabla 4, la dispersión en las concentraciones medidas hace que no se observe este comportamiento para el CO_2 y CH_4 (los ajustes de "best fit" y "intercept (0,0)" no coinciden). Dado el corto periodo comparado, las concentraciones de CO_2 y CH_4 presentan poca variabilidad natural, con lo que la dispersión instrumental se vuelve más significativa, desviando así la recta del "best fit de la relación teórica 1:1. En el caso del H_2O , el rango de la variabilidad natural observada es mucho mayor que la instrumental,

Gas		FC		Δ_a [ppmv]		$\Delta_{\%}$ [%]	
		\bar{x}	σ	\bar{x}	σ	\bar{x}	σ
H ₂ O	v_1	1.004	0.010	2.6	6.7	0.4	1.0
	v_2	1.0023	0.0087	1.8	6.0	0.23	0.87
CO ₂	v_1	1.00093	0.00051	0.38	0.21	0.093	0.050
	v_2	1.00213	0.00044	0.87	0.18	0.213	0.044
CH ₄	v_1	0.99772	0.00054	-0.00420	0.00010	-0.228	0.054
	v_2	0.99900	0.00049	-0.00185	0.00091	-0.100	0.049

Tabla 5: Media y desviación estándar de las magnitudes de comparación presentadas en la sección 2.4 para los tres gases de estudio y las dos versiones del código de inversión v_1 y v_2 .

lo que conduce a un comportamiento promedio casi ideal.

La comparativa (Tabla 5) muestra que las diferencias medias son inferiores al 0.50 % para el H₂O, mientras que se limitan a la mitad, 0.25 %, para el CO₂ y CH₄. Este resultado sugiere que sería necesario aún corregir diferencias sistemáticas entre ambos instrumentos. No obstante, la dispersión observada es tan solo del 0.05 % para el CO₂ y CH₄, la cual está dentro del error instrumental e indica que ambos instrumentos observan similarmente la variabilidad natural de estos dos gases. Para el H₂O, la dispersión es mayor y alcanza el 1 %, lo cual indica un buen acuerdo entre instrumentos dada la amplia variabilidad espacio-temporal que presenta este gas en la atmósfera.

En estudios anteriores [Frey, 2018] se obtiene un valor para el factor de escala del CO₂ y la versión v_1 de 1.0014 ($\sigma = 0.0011$), resultado que está de acuerdo con el obtenido en este trabajo, 1.00093 ($\sigma = 0.00051$).

2.7. Análisis de la dependencia con la geometría de observación

Los espectrómetros EM27 y HR125 miden el espectro solar de absorción de la componente directa, como se comentó anteriormente. Por tanto, la geometría de observación de ambos instrumentos viene determinada básicamente por el ángulo cenital solar (SZA). Este ángulo es el que forma el Sol con la vertical del lugar y, así, toma el valor de 90° al amanecer, disminuye hasta que el Sol alcanza su punto más alto (cenit), para luego aumentar de nuevo hasta los 90° en el ocaso. Nótese que a diferentes SZA la radiación solar recorre distintos caminos ópticos en la atmósfera, por lo que está sujeta a distintos procesos de absorción y dispersión por los componentes atmosféricos. A mayores SZA, mayores masas ópticas recorridas en la atmósfera.

Los instrumentos tienen respuestas ligeramente diferentes ante cambios en la geometría de observación, así como ciertos parámetros empleados en el modelo de inversión, por lo que es de esperar que las magnitudes de comparación muestren cierta dependencia con el SZA. Para comprobar esto, se representa el factor de escala respecto al SZA para los tres gases analizado en la Figura 6. Se darán valores negativos a los ángulos anteriores al mínimo del día (correspondiente al mediodía solar) y positivos a los posteriores, de modo que se muestre la curva de evolución diaria. Se distin-

guirá entre versiones del código del EM27, presentando cada conjunto de datos una dependencia cenital propia con un offset entre ellos.

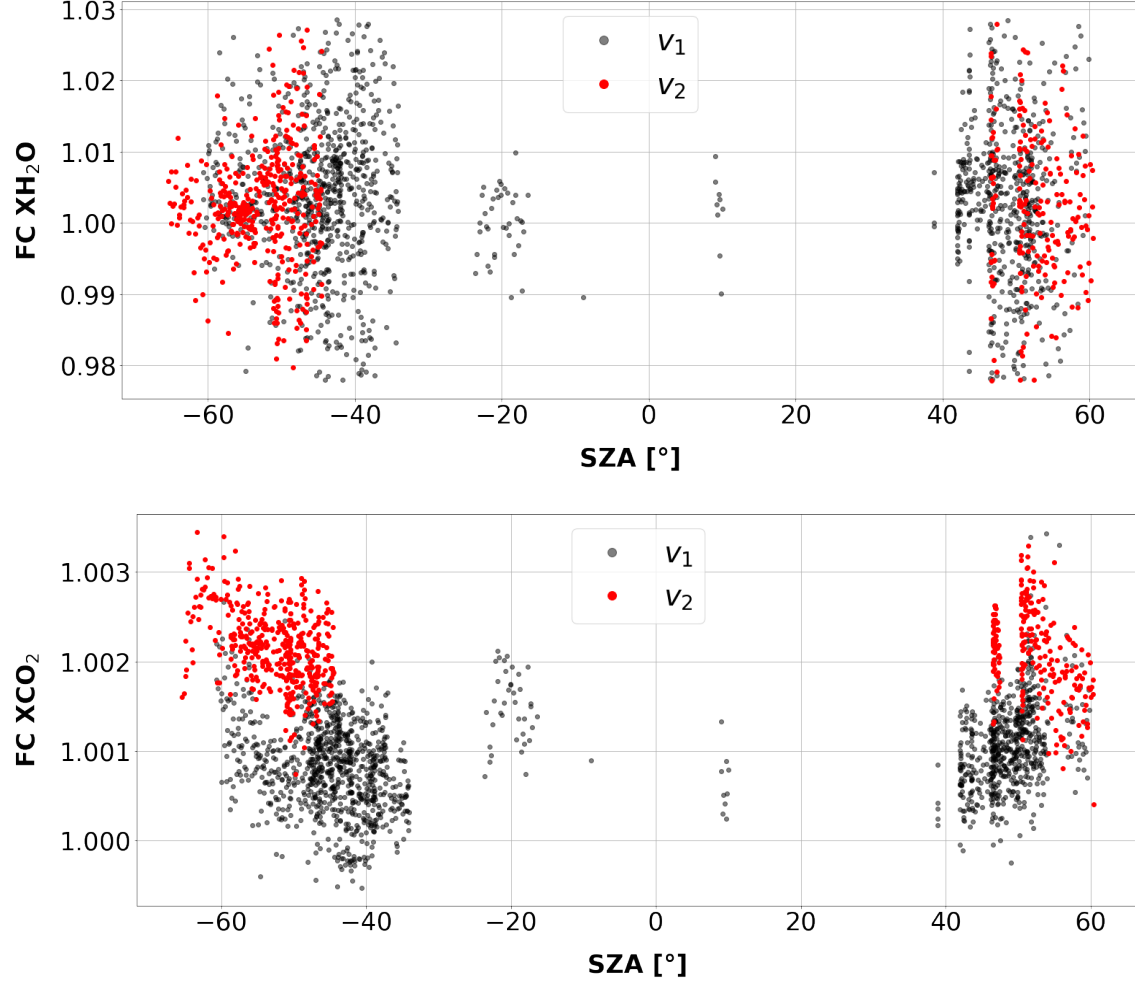


Figura 6a: Factor de escala frente al ángulo cenital solar (SZA, en °) para el H₂O y CO₂.

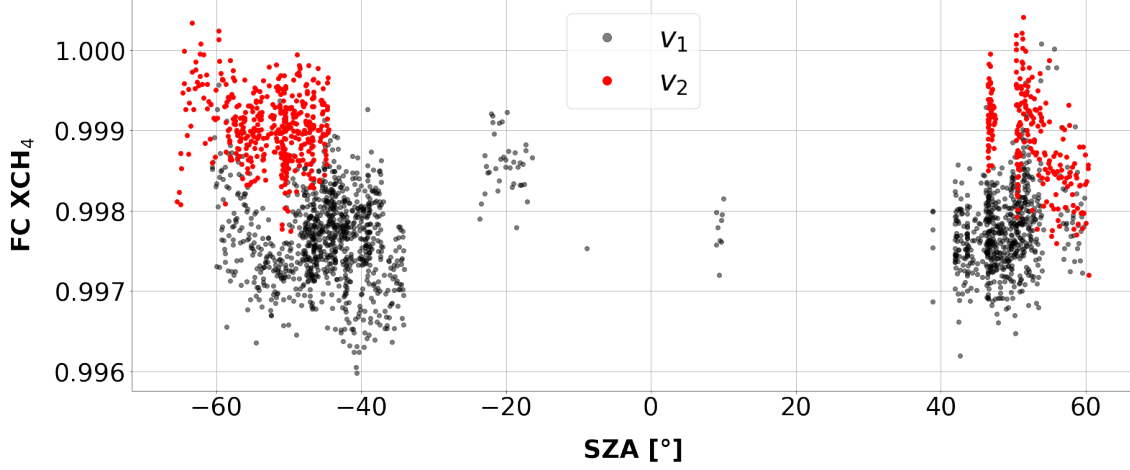


Figura 6b: Factor de escala frente al ángulo cenital solar (SZA, en °) para el CH₄.

En las Figuras 6a y 6b se observa cómo el factor de escala (y por tanto, la discrepancia entre instrumentos) aumenta con el ángulo cenital solar tanto en el CO₂ como en el CH₄, presentando una dependencia en forma de "smile". Este efecto es presumible que tenga lugar también en el vapor de agua, pero queda embebido en la gran dispersión que muestra este gas.

SZA	FC _{CO₂}				FC _{CH₄}			
	v ₁		v ₂		v ₁		v ₂	
	\bar{x}	σ	\bar{x}	σ	\bar{x}	σ	\bar{x}	σ
40° - 50°	1.00094	0.00038	1.00216	0.00030	0.99765	0.00042	0.99919	0.00031
50° - 60°	1.00128	0.00051	1.00209	0.00053	0.99795	0.00057	0.99885	0.00062

Tabla 6: Media y desviación estándar del factor de escala del CO₂ y CH₄ para los intervalos de ángulos cenitales 40° - 50° y 50° - 60°. Se distinguen entre las versiones v_1 y v_2 del código de inversión.

Además del posible impacto de diferencias instrumentales, el principal factor que genera este comportamiento cenital es la dependencia con la masa óptica de los parámetros espectroscópicos que se utilizan para derivar las concentraciones gaseosas, especialmente para el CO₂ [Cardiel, 2017, Frey et al., 2019]. Para corregir este artefacto, se introducen post-correcciones empíricas en el código de inversión [Cardiel, 2017], pero como se observa en la Figuras 6a y 6b, no llegan a corregir completamente esta dependencia, y de forma similar, en las concentraciones de CO₂ y CH₄ derivadas de cada instrumento. En la Tabla 6 se aprecia que para el CO₂ y CH₄, la media y dispersión del FC es superior en intervalos de ángulos cenitales altos respecto a los bajos, excepto para la versión v_2 del CO₂, donde los valores medios son prácticamente iguales. Nótese que para el rango de ángulos cenitales escogidos, la variación de las medias entre intervalos es similar en ambos gases. No obstante, este artefacto es especialmente crítico para SZA altos (por encima de

70-80°), los cuales no se alcanzan en la base de datos comparada en este trabajo.

2.8. Análisis de la dependencia con las concentraciones

La discrepancia entre el EM27 y el HR125 podría tener relación con el valor de las concentraciones de los gases, ya que la sensibilidad a concentraciones extremas o el umbral de saturación puede ser distinto entre instrumentos.

En la Figura 7 se toma el FC como indicador de la discrepancia entre dispositivos y se representa frente a las concentraciones medidas por el HR125. En el caso del CO_2 para ambas versiones y en el CH_4 en la versión v_2 , la discrepancia parece disminuir a medida que aumentan las concentraciones de ambos gases. No obstante, sería necesario un conjunto de datos mayor para confirmar estas tendencias, ya que las medidas fueron tomadas en un periodo temporal corto con una variabilidad limitada. Para el H_2O no se observa relación entre ambas magnitudes, dada la alta variabilidad de las concentraciones de este gas.

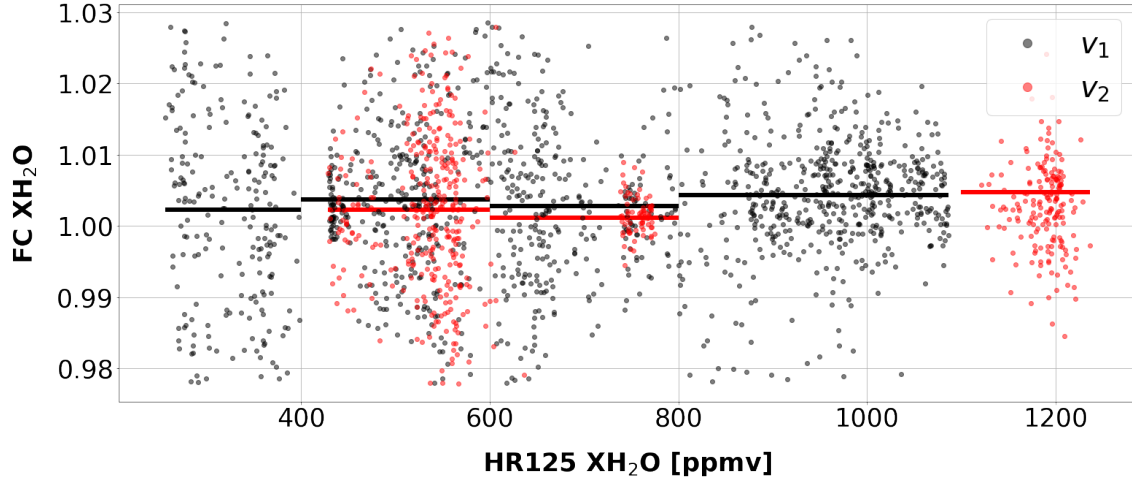


Figura 7a: Factor de escala del H_2O frente a sus concentraciones medidas por el HR125. Se señala la media del FC en distintos intervalos con líneas horizontales, negras para la versión v_1 y rojas para la versión v_2 .

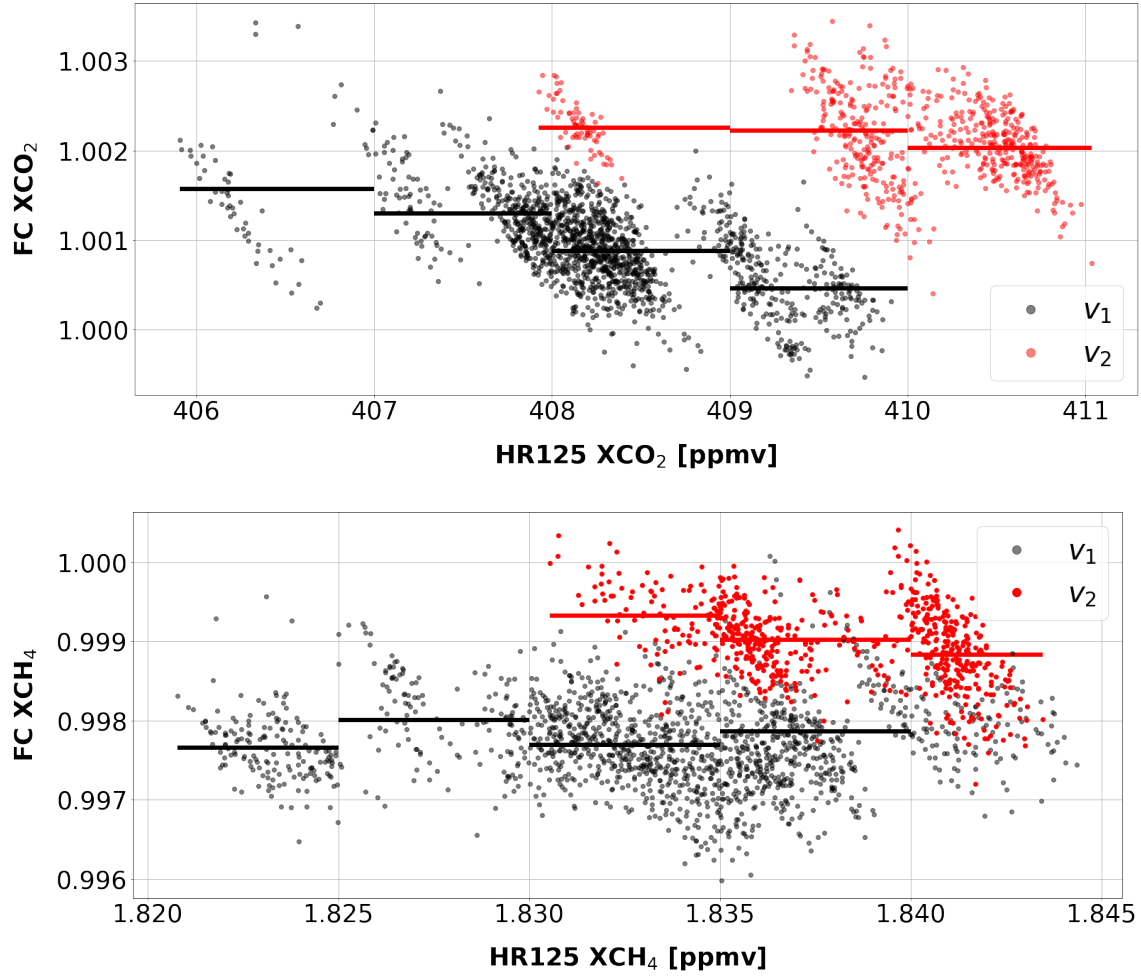


Figura 7b: Factor de escala del CO₂ y CH₄ frente a sus respectivas concentraciones medidas por el HR125. Se señala la media del FC en distintos intervalos con líneas horizontales, negras para la versión v_1 y rojas para la versión v_2 .

2.9. Resumen y conclusiones

Las Prácticas Externas consistieron en la intercomparación de las medidas de concentraciones atmosféricas de tres gases de efecto invernadero, H₂O, CO₂ y CH₄, derivadas por dos espectrómetros FTIR: el EM27, de baja resolución espectral, y el HR125, de alta resolución espectral. Para ello, se realizó un estudio preliminar de las medidas disponibles y se interceptaron las bases de datos de ambos instrumentos bajo un criterio colocación temporal, definiendo tres magnitudes de comparación: el factor de escala, la diferencia absoluta y porcentual.

Previo a la intercomparación se analizó la efectividad de tres filtros a la hora de detectar valores atípicos en las series de datos, destacando el filtro basado en la comparación de las dos series frente

al de concentraciones de CO_2 y al de distancia intercuartil sobre las series independientes. Se examinó, desde un punto de vista cuantitativo, la comparativa entre instrumentos, concluyendo una alta similitud entre las observaciones de ambos instrumentos. Por último, se analizó la dependencia de las discrepancias con la geometría de observación y las concentraciones medidas, resultando en un aumento de la misma con el ángulo cenital solar y mostrando una relación nula con las concentraciones en algunos casos y disminuyendo ligeramente en otros. Si bien, sería recomendable extender este análisis a un periodo mayor para confirmar los resultados obtenidos.

3. Valoración de los conocimientos y competencias adquiridos en relación con los estudios universitarios

Diversas asignaturas del grado de Física han facilitado en gran medida las tareas llevadas a cabo en estas Prácticas Externas.

La asignatura que me ha resultado de mayor utilidad ha sido Computación Científica, permitiéndome manejar con gran soltura el lenguaje de Python a la hora de hacer gráficas, cálculos, regresiones e implementar algoritmos y herramientas necesarias. Además, en la asignatura de Física Computacional me familiaricé con la interfaz de Jupyter Notebook, lo cual me aportó mayor organización y rapidez a la hora de programar y ejecutar código.

Por otro lado, cursar las técnicas experimentales ITE, TE I, TE II y TE III ha sido beneficioso, no solo para el análisis y discusión de resultados, sino también para su presentación y estudio estadístico básico.

El módulo de óptica de TE III resultó particularmente de gran provecho ya que se profundizó en conceptos de interferometría y espectroscopía, necesarios a la hora de entender el funcionamiento de un espectrómetro FTIR y la derivación de concentraciones de gases atmosféricos a partir de su espectro de absorción. A este último objetivo contribuyeron también las asignaturas de Astrofísica, reforzando los conocimientos de espectroscopía, y Métodos Matemáticos V, abordando las Transformadas de Fourier.

En la optativa de Física de la Energía y Medioambiente se discutieron las fuentes, tendencias, control y efectos sobre la salud y climáticos de varios aerosoles y gases atmosféricos, entre ellos el CO_2 y CH_4 , lo cual me aportó más información sobre los mismos y sobre términos relacionados con la calidad del aire. En última instancia, también me motivó a realizar las prácticas en el CIAI y llevar a cabo las tareas expuestas en esta memoria.

Hubiera esperado aplicar conocimientos adquiridos en Óptica y Física de la Atmósfera pero no fue el caso, centrándose esta última asignatura en dinámica atmosférica y abordando muy sutilmente los conceptos de transferencia radiativa y composición atmosférica que se utilizan en este trabajo. De cualquier modo, la formación en el grado fue lo suficientemente plural y amplia para no encontrar dificultades a la hora de realizar las tareas propuestas.

4. Problemas planteados y procedimiento seguido para su resolución

En los días próximos al inicio del periodo de prácticas, se declaró una pandemia por el virus COVID-19 que provocó la activación del estado de alarma nacional, con la imposición de unas fuertes medidas de restricción de la movilidad sobre la mayor parte de la población e imposibilitando, por tanto, el acceso al centro designado para las prácticas. Como alternativa, se sustituyó la tutorización presencial por contacto telemático via e-mail y videollamada. Además, se dio mayor peso a la memoria, utilizándola para profundizar en los conceptos dados y asegurar la comprensión de las tareas y la adquisición de conocimientos.

Las prácticas originales incluían realizar subidas periódicas al Observatorio de Izaña para tomar medidas con los dos instrumentos FTIRs, con las que luego derivar las concentraciones de los gases. Esto tampoco se pudo llevar a cabo, así que se me proporcionaron directamente las concentraciones para trabajar con ellas y realizar el resto de tareas previstas.

Las condiciones desfavorables propiciadas por el estado de alarma (regreso al domicilio familiar, restricción de movilidad, distanciamiento social, incertidumbre...), que afectaron a la realización de la prácticas, fueron contrarrestadas con el alivio del volumen de tareas (en gran parte debido a lo comentado en el párrafo anterior) y una mayor flexibilidad, atención y comprensión por parte de mis tutores.

5. Identificación de las aportaciones que han supuesto las prácticas en materia de aprendizaje

La intercomparación de los instrumentos me ha permitido conocer el comportamiento temporal de los gases tratados y su estudio, así como asentar conocimientos relacionados con interferometría, espectroscopía y transformada de Fourier.

Además de mostrar un ejemplo concreto de las labores que puede desempeñar un físico, las prácticas contribuyen a la capacidad de aunar conocimientos multidisciplinarios en la ejecución de las tareas que durante el grado se habían enseñado de manera compartimentada dentro de cada asignatura, dando así una visión más realista del trabajo en ciencia.

En este trabajo, al ser los espectrómetros los protagonistas, he podido reparar en la gran importancia de la precisión y fiabilidad de los instrumentos a la hora de extraer medidas, y el balance que debe existir entre estas características y el coste, mantenimiento, distribución y emplazamiento de los dispositivos.

Asimismo, ha reforzado la capacidad de análisis crítico de resultados y de discusión científica de los mismos.

6. Autoevaluación de las prácticas

Las prácticas han cumplido su propósito como toma de contacto con el mundo laboral, donde he podido aplicar los conocimientos adquiridos en el grado así como completar mi formación.

En particular, esta oportunidad enmarcada bajo el CIAI me ha permitido acercarme a una temática de gran interés y actualidad como son los principales gases que influyen en el efecto invernadero y los métodos para derivar sus concentraciones.

Han sabido adaptarse a la forzada y repentina modalidad telemática, replanteando los contenidos, preparando y suministrando los datos necesarios y ofreciendo alternativas a las tutorización presencial. Por otro lado, la implicación de la tutora ha sido total, mostrando gran disponibilidad, flexibilidad e interés en que el alumno saque el máximo provecho de la experiencia. Sus explicaciones son claras y ofrecen una visión global de la materia, no limitándose completamente a los contenidos concretos que nos ocupaban. Ello, junto a su trato cercano y la pasión que muestra por su trabajo, ha facilitado enormemente el paso por estas prácticas.

Por tanto, considero que han sido una muy buena experiencia y una manera excelente de cerrar el grado.

Referencias

- J. L. B. Cardiel. *CO₂ en el Centro de México por Espectroscopia Infrarroja de Absorción Solar*. PhD thesis, Universidad Nacional Autónoma de México, Noviembre 2017.
- M. Frey, M. K. Sha, F. Hase, M. Kiel, T. Blumenstock, R. Harig, G. Surawicz, N. M. Deutscher, K. Shiomi, J. E. Franklin, H. Bösch, J. Chen, M. Grutter, H. Ohyama, Y. Sun, G. Butz, A. and Mengistu Tsidu, D. Ene, D. Wunch, Z. Cao, O. Garcia, M. Ramonet, F. Vogel, and J. Orphal. Building the collaborative carbon column observing network (coccon): long-term stability and ensemble performance of the em27/sunfourier transform spectrometer. *Atmospheric Measurement Techniques*, 12(3):1513–1530, 2019. doi: 10.5194/amt-12-1513-2019. URL <https://www.atmos-meas-tech.net/12/1513/2019/>.
- M. M. Frey. *Characterisation and application of portable solarabsorption spectrometers for the detection of greenhouse gas emissions from regional anthropogenic sources*. PhD thesis, Karlsruher Instituts für Technologie (KIT), July 2018.
- T. F. Stocker, G.-K. Qin, Dahe and Plattner, M. Tignor, S. K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex, and P. M. Midgley. Climate change 2013: The physical science basis. Technical report, 2013.