

BILBOKO INGENIARITZA ESKOLA ESCUELA DE INGENIERÍA DE BILBAO

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA ESPACIAL TRABAJO FIN DE MASTER

NUBES Y NIEBLAS EN LA ATMÓSFERA DE NEPTUNO A PARTIR DE OBSERVACIONES DEL TELESCOPIO ESPACIAL HUBBLE





Estudiante: Reyes Guerrero, Jaime

Director: Pérez Hoyos, Santiago

Resumen

El estudio de las nubes, nieblas y aerosoles de una atmósfera planetaria involucra el conocimiento de la física que existe detrás de la teoría de transporte radiativo, el análisis de imágenes planetarias de las que extraer los datos observacionales y la aplicación de técnicas computacionales para trabajar con los modelos atmosféricos a partir de dichos datos.

Este trabajo se centra en el estudio de las nubes y nieblas de la atmósfera de Neptuno. Para ello, se utilizará la librería Elkano para "navegar" las imágenes de Neptuno tomadas por el instrumento *Wide Field Camera 3* del Telescopio Espacial Hubble dentro del programa OPAL. Estas imágenes también serán calibradas fotométricamente de forma que se puedan extraer datos observacionales de las mismas. Con estos datos extraídos, se prepararán los códigos que implementen las primeras simulaciones y *retrievals* atmosféricos de la atmósfera del planeta utilizando *Planetary Spectrum Generator* de NA-SA Goddard Space Flight Center y MultiNest, una herramienta de inferencia Bayesiana.

Laburpena

Planeta-atmosfera bateko hodeiak, lainoak eta aerosolak aztertzeak garraio erradiatiboaren teoriaren atzean dagoen fisikaren ezagutza, behaketa-datuak ateratzeko planeta-irudien analisia eta datu horietatik abiatuta eredu atmosferikoekin lan egiteko teknika konputazionalen aplikazioa barnean hartzen ditu.

Lan honen ardatza Neptunoren atmosferako lainoak eta hodeiak aztertzea da. Horretarako, Elkano liburu-denda erabiliko da Hubble Espazio Teleskopioaren Wide Field Camera 3 tresnak hartutako Neptunoren irudiak "nabigatzeko", OPAL programaren barruan. Irudi horiek ere fotometrikoki kalibratuko dira, haietatik behaketa-datuak atera ahal izateko. Ateratako datu horiekin NASA Goddard Space Flight Center-en *Planetary Spectrum Generator* eta inferentzia bayesiarreko MultiNest tresna erabiliz planetako eguratsaren lehen simulazioak eta *retrieval* atmosferikoak inplementatzen dituzten kodeak prestatuko dira.

Abstract

The study of clouds, hazes and aerosols in a planetary atmosphere involves knowledge of the physics behind radiative transport theory, the analysis of planetary images from which to extract observational data, and the application of computational techniques to work with atmospheric models from such data.

This project is focused on the study of clouds and hazes in Neptune's atmosphere. For this purpose, the Elkano library will be used to 'navigate' images of Neptune taken by the Hubble Space Telescope's Wide Field Camera 3 instrument within the OPAL program. These images will also be photometrically calibrated so that observational data can be extracted from them. With these extracted data, codes will be prepared to implement the first atmospheric simulations and retrievals of the planet's atmosphere using NASA Goddard Space Flight Center's Planetary Spectrum Generator and MultiNest, a Bayesian inference tool.

Indice

1	Int	roducción	4
	1.1	Contexto	4
	1.2	Objetivos	5
	1.3	Conexión con el MCyTE	6
2	Me	etodología observacional	7
	2.1	HST/WFC3	7
	2.2	Programa OPAL	8
	2.3	Navegación de imágenes: Elkano	8
		2.3.1 Método de navegación	4
	2.4	Calibración fotométrica	8
		2.4.1 Método de calibración	8
		2.4.2 Cortes fotométricos	0
		2.4.3 Cálculo del albedo geométrico	1
3	Mo	delos de Transporte Radiativo 2	4
	3.1	Fundamento teórico	4
	3.2	Planetary Spectrum Generator	7
	3.3	Problema inverso: retrieval	0
	3.4	Técnicas de inferencia bayesiana: MultiNest	1
4	Re	sultados 3	8
	4.1	Navegación	8
	4.2	Calibración	2
		4.2.1 Ajuste de Minnaert	6
	4.3	Modelización	8
		4.3.1 Modelo inicial	8
		4.3.2 Nelder-Mead	9
		4.3.3 MultiNest	1
5	Co	nclusiones 5	5
	5.1	Cumplimiento de objetivos	6
	5.2	Trabajo futuro	6

1. Introducción

1.1. Contexto

Durante décadas, el sistema solar se ha tenido como el prototipo de sistema planetario, tanto en estructura, como en formación (Pfalzner et al., 2015). Sin embargo, con el descubrimiento de nuevos sistemas planetarios ha sido posible romper el paradigma y concluir que el sistema solar no es más que un ejemplo dentro del abanico de posibilidades que existe en cuanto a formación planetaria. Esto no reduce la importancia del estudio del sistema solar pues este permite analizar de cerca los diversos fenómenos dinámicos que se ven involucrados en la evolución de uno de los elementos más relevantes dentro del estudio planetario y foco de este trabajo: las atmósferas.

La atmósfera primitiva de la Tierra era bastante similar a la que se observa en planetas como Venus o Marte, compuestas principalmente por CO_2 y N_2 . En aquel momento, la temperatura de la superficie era superior a 100°C, por lo que el agua se concentraba en la atmósfera en forma de vapor. Una vez la temperatura descendió del punto de ebullición del agua para la presión existente, fue cuando se formaron los océanos (Sánchez-Lavega, 2011). La existencia de océanos durante un periodo suficientemente largo, así como la presencia de carbono y nitrógeno en el sistema océano-atmósfera, pudieron haber sido los condicionantes para la formación de organismo fotosintéticos (Hart, 1978), responsables del aumento del oxígeno en la atmósfera durante el evento conocido como la Gran Oxidación.

Así como los planetas del sistema solar han evolucionado geológicamente desde su formación, también lo han hecho sus atmósferas, que son sistemas dinámicos con condiciones muy variadas para cada planeta. Para el caso de Marte y Venus, los otros planetas rocosos con atmósfera, el CO_2 es el compuesto que se presenta en mayor abundancia, siendo el gas atmosférico dominante en el caso de Marte y el responsable de los 464°C superficiales en Venus (Cockell, 1999) al originar un efecto invernadero desbocado.

En el caso de los planetas gigantes, sus atmósferas son primigenias, permaneciendo relativamente inalteradas desde la formación planetaria, y están compuestas principalmente de H_2 y He aunque podemos encontrar otros compuestos como condensables en la zona alta de la troposfera: por ejemplo NH₃ y H₂O en Júpiter y Saturno, a los que debemos añadir CH₄ en el caso de Urano y Neptuno. Estos condensables, unidos a las nieblas de origen fotoquímico en los niveles más altos, condicionan en buena medida los espectros reflejados y emitidos por estos planetas y tienen una especial relevancia en, por ejemplo, explicar los diferentes colores que se pueden percibir en las imágenes que obtenemos de ellos.

No todos los planetas del sistema solar han tenido asignadas el mismo número de misiones espaciales, llegando al caso límite de los gigantes helados que únicamente han sido visitados con los sobrevuelos de las misiones Voyager (Fletcher et al., 2020). El estudio de las atmósferas de estos planetas está principalmente basado en la observación en remoto que permite analizar tanto composición, estructura vertical y fenómenos atmosféricos a falta de observación in situ. Precisamente para explicar estas observaciones remotas se ha propuesto recientemente un modelo "holístico" que explica las observaciones realizadas en longitudes de onda visibles e infrarrojo cercano por varios instrumentos como HST/WFC3 o GEMINI/-NIFS (Irwin et al., 2022). Este modelo demuestra que los espectros reflejados están fuertemente influidos por la presencia de diferentes capas de nubes y nieblas. Además, incluye la información de oscurecimiento al limbo y es válido tanto para Urano como para Neptuno con la siguiente estructura vertical:

- Aerosol-1: Una nube profunda en el entorno de los 5 bar compuesta de una mezcla de condensación de H_2S con niebla fotoquímica.
- Aerosol-2: Una capa de hielo de origen fotoquímico en torno a los 1-2 bar en una zona verticalmente muy estable.
- Aerosol-3: Una niebla fotoquímica fina que se extiende verticalmente hasta la estratosfera.

En el caso de Neptuno se propone también una niebla adicional en el entorno de los 0.2 bar para explicar el exceso de reflexión de radiación infrarroja.



Figura 1: Resumen de la distribución de aerosoles para Urano y Neptuno. Imagen extraída de Irwin et al. (2022).

Este modelo, que marca un nuevo paradigma para el estudio de las atmósferas de los gigantes helados, ha sido generado gracias al análisis de las observaciones, la utilización de técnicas de transporte radiativo y de la resolución de *retrievals* atmosféricos, aspectos muy relacionados con este Trabajo de Fin de Máster.

1.2. Objetivos

En este trabajo se parte de imágenes de Neptuno obtenidas por el Telescopio Espacial Hubble que deberán ser manipuladas y analizadas con el propósito de realizar modelos atmosféricos cuyos ajustes de parámetros respondan a las observaciones.

Para ello, se pueden listar los siguientes objetivos a cumplir:

- 1. Navegación automática de las imágenes: adaptar funciones de la librería Elkano para trabajar con imágenes de Neptuno tomadas por WFC3 y desarrollar códigos que permitan la navegación masiva de todas las imágenes disponibles.
- 2. Calibración de las imágenes: adaptar códigos disponibles para la calibración de imágenes de otros planetas a Neptuno obteniendo el valor de I/F en cada píxel. Se deberá verificar también la consistencia temporal y espectral de la calibración.
- 3. Creación de planisferios: a partir de las imágenes navegadas y calibradas, generar un planisferio para cada una de ellas que permita realizar cortes fotométricos a cualquier latitud y longitud.
- 4. Obtención de parámetros de Minnaert: Obtener la reflectividad nadir y el coeficiente de oscurecimiento hacia el limbo aplicando una regresión lineal para todas las latitudes de cada planisferio.
- 5. Almacenaje en archivos FITS: crear ficheros tipo FITS tanto para las imágenes calibradas/navegadas, como para los planisferios y los resultados obtenidos en los ajustes del objetivo 4 para poder trabajar con dichos datos.
- 6. **Modelos de transporte radiativo**: utilizar *Planetary Spectrum Generator* y su API en Python para generar un modelo de transporte radiativo de la atmósfera de Neptuno basado en un modelo de referencia.
- 7. **Inversiones**: preparar los códigos para comenzar con las primeras estimaciones de los valores de las abundancias de los aerosoles principales de la atmósfera de Neptuno utilizando el algoritmo Nelder-Mead y técnicas de inferencia bayesiana (MultiNest).

1.3. Conexión con el MCyTE

Gran parte de los contenidos de este trabajo están relacionados de una forma muy directa con varias asignaturas del Máster en Ciencia y Tecnología Espacial tanto de carácter científico como científico-tecnológico:

- Atmósferas Planetarias: en esta asignatura se estudian todos los conceptos básicos en cuanto a las atmósferas de los planetas del sistema solar, incluyendo los primeros fundamentos de transporte radiativo.
- Detectores y Sensores: en esta asignatura se presentan los principios de fotometría y radiación que son de especial relevancia en el proceso de calibración. Además, se introdujo por primera vez el formato de archivos FITS.
- Astronomía y Astrofísica: en esta asignatura se adquieren los conceptos principales sobre observación astronómica, sistemas de coordenadas, así como conceptos fotométricos en profundidad.
- Física del Sistema Solar: en esta asignatura, además de analizarse con una perspectiva mucho más general a los cuerpos del sistema solar, se estudia el concepto de planetología comparada y la importancia de las atmósferas planetarias en este campo.

2. Metodología observacional

En esta sección se presentará, en primer lugar, el Telescopio Espacial Hubble, así como el programa OPAL ¹, dentro del cual se enmarcan las imágenes utilizadas en este trabajo. Las principales funcionalidades de Elkano como software de navegación planetaria también serán descritas y se explicará cómo se han aplicado para obtener imágenes navegadas de Neptuno con un formato concreto.

Por último, se explicará la utilidad de la calibración fotométrica, el método seguido en este trabajo y qué uso tienen los metadatos de las imágenes de Hubble en este proceso, así como la importancia de la verificación de la calibración mediante cortes fotométricos y el cálculo del albedo geométrico.

2.1. HST/WFC3

El telescopio espacial Hubble (HST) orbita la Tierra en una órbita prácticamente circular desde 1990 y es uno de los instrumentos astronómicos que mayores contribuciones ha realizado a la astronomía. Tiene un diseño Ritchey-Chrétien cuyo espejo primario tiene un diámetro de 2.4 metros y el secundario de 0.3 metros.



Figura 2: Hubble Space Telescope. Imagen extraída de Crew of STS-125 (2009).

El inicio de este telescopio no fue el más sencillo. Dejando de lado los primeros ajustes necesarios durante las órbitas de verificación que cualquier instrumento espacial necesita, los ingenieros y científicos de la misión tuvieron que superar diversas adversidades: una de las antenas no podía rotar al haberse enredado con un cable de alimentación y se detectaron vibraciones que complicaban la orientación del telescopio, entre otras (Shayler y Harland, 2016).

Pero, sin duda, el mayor problema que presentó este telescopio tras su lanzamiento fue el descubrimiento de un fallo en el pulido del espejo primario que provocaba que el sistema óptico sufriese aberración esférica. Esto, a pesar de que ya se conseguía mayor resolución que con cualquier telescopio terrestre de la época, no permitía sacarle el máximo rendimiento a las prestaciones del HST.

Desde el planteamiento de la misión, ya se consideraba realizar diversas misiones de servicio (*Servicing Missions*) en las que el telescopio podría ser visitado utilizando el

 $^{^1} Outer \ Planet \ Atmospheres \ Legacy$

transbordador espacial con el objetivo de instalar nueva instrumentación o reparar los elementos defectuosos. Fue la primera de estas misiones (SM1) la que tenía como objetivo principal instalar un sistema de corrección de la óptica (COSTAR) e instalar una nueva cámara planetaria (WFPC2) (NASA,2023). Estas operaciones, sumadas a otras de mantenimiento, hicieron posible obtener imágenes con la calidad que se estimaba tras el diseño del telescopio.

En total se llevaron a cabo cinco misiones de servicio en las que se sustituyeron instrumentos por otros con más prestaciones y se realizaron tareas de mantenimiento generales. Durante la última de ellas, la SM4, se instaló la que es la actual cámara de gran angular del telescopio: la *Wide Field and Planetary Camera 3* (WFC3).

Esta cámara sustituyó a la anterior y proporcionó una capacidad de imagen en un rango espectral mayor al contar con dos canales, uno para el ultravioleta entre 200nm y 1000 nm (UVIS) y otro para el infrarrojo cercano entre 850nm y 1700nm (NIR) (Dressel y Marinelli, 2023). La WFC3 permite tomar imágenes limitadas por difracción en un campo de visión cuadrado de 160 segundos de arco (Turner-Valle et al, 2004).

2.2. Programa OPAL

El programa OPAL es un proyecto que tiene como objetivo realizar observaciones periódicas con el telescopio espacial Hubble, utilizando el canal UVIS de la WFC3, de los planetas gigantes (Júpiter, Saturno, Urano y Neptuno) para tener una cobertura temporal de la evolución de sus atmósferas (Simon et al., 2015). La mayoría de estas observaciones se sitúan en el entorno de la oposición de los planetas, si bien no están necesariamente limitadas a esos momentos.

Espectralmente, en este programa se utilizan siete filtros astronómicos que pretenden cubrir un rango entre los 450nm y los 900nm, con diferentes anchuras, cuyas especificaciones en transmisión se pueden observar en la Figura 3.

2.3. Navegación de imágenes: Elkano

Todas las imágenes de Neptuno tomadas por el telescopio espacial Hubble que se utilizarán en este trabajo contienen información de la cantidad de luz detectada en cada píxel, sin haberse realizado ningún tipo de filtrado o procesado que haya alterado los datos. Esto es necesario, pues, de lo contrario, no se podría obtener información fotométrica veraz de la atmósfera del planeta.

Sin embargo, para poder trabajar con estas imágenes y obtener la mayor cantidad de información posible, si será necesario manipularlas. La primera forma en la que estas imágenes deben ser manipuladas es mediante la navegación del disco planetario presente en cada una de ellas.

La navegación de una imagen planetaria consiste en asignar a cada píxel del planeta unas coordenadas en latitud y longitud, que pueden venir expresadas en dos sistemas: sistema planetográfico o planetocéntrico.



Figura 3: Filtros utilizados en el programa OPAL.

La latitud planetocéntrica ϕ_c se determina a partir del centro del planeta y del plano ecuatorial del planeta, mientras que la latitud planetográfica ϕ_g se define a partir del plano ecuatorial y la vertical local en el punto cuya latitud se desee determinar.



Figura 4: Latitud planetocéntrica y planetográfica.

Por otro lado, la longitud planetográfica y planetocéntrica se diferencian en el convenio de signos. La longitud planetográfica tendrá en cuenta el sentido de rotación del planeta para definir las longitudes positivas, mientras que la longitud planetocéntrica siempre será positiva hacia el este.

Otro concepto importante es el del meridiano central, que se define como el meridiano

que pasa por el centro del disco del planeta en una imagen. Este meridiano se suele utilizar en navegación planetaria como referencia para las longitudes.

Existen diversos *software* de navegación planetaria como PLIA², desarrollado por el Grupo de Ciencias Planetarias de la UPV/EHU, o WinJUPOS³ que permiten, a partir de la definición manual de fronteras como los polos o el limbo, obtener las coordenadas en latitud y longitud de cada píxel. Sin embargo, a pesar de que estos programas necesiten una operación manual mínima, no son automatizables al requerir la intervención del usuario, y como uno de los objetivos principales de este trabajo es la navegación masiva de imágenes de Neptuno de forma automática, estas herramientas no serán empleadas. En su lugar, se utilizará Elkano.



Figura 5: Ejemplo de medida con WinJUPOS.

Elkano es una librería de Python desarrollada por Jorge Hernández Bernal durante su tesis doctoral para la navegación de imágenes de MEX/VMC (Hernández-Bernal, 2022). Con esta herramienta se han realizado estudios sobre fenómenos atmosféricos en Marte como, por ejemplo, la nube alargada de hielo sobre el volcán Arsia Mons detectada en 2018 (Hernández-Bernal et al., 2021 y Hernández-Bernal et al., 2022). De hecho, los únicos trabajos que han empleado Elkano han estado centrados en observaciones de Marte utilizando la cámara VMC. Existe incluso una versión en javascript que se utiliza en una versión web y en una aplicación llamada Mars Studio para trabajar solo con imágenes de este planeta. Sin embargo, la gran ventaja de esta librería es la modularidad, que permite adaptar todo este paquete a otras naves espaciales, telescopios y planetas.

²http://www.ajax.ehu.es/PLIA/index.html

³http://jupos.privat.t-online.de/index.htm

En base al seminario impartido por Jorge Hernández Bernal, autor de Elkano, al Grupo de Ciencias Planetarias de la UPV/EHU, se va a proceder a describir los aspectos más importantes de esta librería para poder presentar posteriormente las estrategias seguidas en este trabajo en la navegación de imágenes de Neptuno tomadas por el HST.

El funcionamiento interno de Elkano se basa principalmente en la programación orientada a objetos y en el álgebra lineal aplicada a operaciones geométricas. La primera de estas características permite definir los elementos principales de la navegación (proyección, cámara y planeta) en forma de clases y la segunda posibilita realizar la propia navegación de una forma compacta a través de proyecciones y cambios de sistemas de referencia.

Clase camera

La clase *camera* permite especificar el instrumento con el que se ha realizado la observación. Dentro de Elkano, las cámaras tienen los siguientes atributos:

- Sistema de referencia (*frame*).
- Nave espacial en la que va embarcada.
- Número de píxeles.
- Tamaño de píxeles.

Por otro lado, las funciones más importantes definidas para los objetos de tipo *camera* son las **funciones de proyección**, que permiten transformar las coordenadas de un punto en el sistema de referencia de la imagen al sistema de referencia de la cámara y viceversa.

Clase planet

La clase *planet* permite especificar las propiedades principales del planeta que esté presente en la imagen que se quiere navegar. Fundamentalmente, estos se definen por su forma, que se modelará normalmente como esférica o elipsoidal.

Los objetos de tipo *planet* tienen dos funciones principales: la función de forma, que define el modelo geométrico del planeta, y la **función de intersección** que permite calcular la intersección del punto observado con la superficie del planeta. Para el caso de un modelo de planeta esférico, partiendo del vector unitario de observación u, el vector que une el centro del sistema de referencia del planeta con el centro del sistema de referencia de la cámara v y el radio del planeta R, se puede encontrar la distancia al punto de observación d y, a partir de esta, el vector que une el centro del planeta con el planeta con el punto observado.

Como se puede observar en la Figura 6, el módulo del vector que une el centro del planeta con el punto observado coincide con el radio del planeta y la distancia d se puede encontrar resolviendo la siguiente ecuación:

$$|v+d\cdot u|^2 = R^2 \tag{1}$$



Figura 6: Función de intersección de la clase *planet*.

Desarrollando, resulta una ecuación cuadrática de la que es inmediato obtener d:

$$d^{2} \cdot |u|^{2} + d \cdot (2 \cdot v \cdot u) + |v|^{2} - R^{2} = 0$$
⁽²⁾

Conociendo d, se puede obtener el vector $v + u \cdot d$, y, por tanto, la posición del punto observado respecto al sistema de referencia del planeta.

Relacionando esto con la clase *camera*, la función de proyección de esta clase es la que permite obtener el vector unitario de observación u. Por tanto, ambas clases, camera y planet, son esenciales para la navegación de las imágenes. Sin embargo, será la clase *navigate* la que se encargue del proceso de navegación en su conjunto.

Clase navigate

La clase *navigate* es la clase principal de Elkano y desde la que se pueden manejar los otros módulos. Las dos funciones principales de la clase *navigate* son las que realizan la navegación de las imágenes y su funcionamiento en detalle se explica a continuación.

Función xy2lonlat(): Esta función calcula la latitud y la longitud, ambas planetocéntricas, de un punto de la imagen a partir de sus coordenadas (x,y) en la misma. El funcionamiento de esta función se puede resumir en tres pasos:

1) A partir de las coordenadas (x,y) en la imagen, se obtiene el vector unitario de observación en el sistema de referencia de la cámara, haciendo uso de una de las funciones de proyección de la clase *camera* (im2cam()).

2) Se calculan las coordenadas del punto observado en el sistema de referencia del planeta mediante la función de intersección de la clase planet (calc_intersec()).

3) Se obtiene la latitud y longitud del punto observado a partir de un cambio a coordenadas esféricas.



Figura 7: Función xy2lonlat().

• Función *lonlat2xy()*: Esta función es la complementaria a la función anterior y, por tanto, calcula las coordenadas (x,y) de un punto en la imagen a partir de su latitud y longitud planetocéntricas. Los pasos en los que se puede resumir el funcionamiento de esta función son:

1) Se calculan las coordenadas del punto observado en el sistema de referencia del planeta a partir de longitud y la latitud del mismo pasando de coordenadas esféricas a cartesianas.

2) Se realiza un cambio de sistema de referencia del sistema de coordenadas del planeta al sistema de referencia de la cámara.

3) Se calculan las coordenadas (x,y) en la imagen a partir del vector en el sistema de referencia de la cámara con la función de proyección de la clase *camera* inversa a la utilizada en *xy2lonlat* (*cam2im()*).



Figura 8: Función lonlat2xy().

Tanto la función xy2lonlat() como lonlat2xy() devuelven, además de las respectivas coordenadas, dos parámetros booleanos que proporcionan la siguiente información:

- Parámetro visto: si dadas las coordenadas (x,y) en la imagen de un punto, se tiene una correspondencia en latitud y longitud, es decir, si el punto pertenece al planeta, este parámetro tendrá valor True. Se dice entonces que el punto es visto.
- Parámetro visible: si un punto es visto y su posición en el planeta es tal que ha sido observado por la cámara, se dice que será visible y este parámetro tendrá valor True. Como las operaciones geométricas se realizan en tres dimensiones, este parámetro permite garantizar que las coordenadas en latitud y longitud que se están calculando son las del punto que está en la cara del planeta vista por la cámara.

La existencia de estas tres clases permiten, tal y como ya se ha comentado, aplicar Elkano a cualquier planeta e instrumento siempre que se definan sus propiedades físicas y geométricas.

Para el caso de observaciones amateur, la posición del instrumento siempre estará sobre la superficie de la Tierra, sin embargo, para instrumentos embarcados en naves espaciales quizás no sea tan inmediato obtener las relaciones geométricas entre la cámara y el planeta. Es aquí donde puede entrar en juego SPICE.

SPICE es un sistema de información que provee las relaciones geométricas existentes entre las naves espaciales y los instrumentos a bordo y los cuerpos del sistema solar (Acton Jr, 1996 y Acton et al., 2018). La integración de SPICE en Elkano hace de esta una herramienta muy versátil y generalizada.

Las imágenes tomadas por el telescopio espacial Hubble que se utilizarán en este trabajo tienen una particularidad que hace que la navegación de las mismas se realice de una manera ligeramente diferente. Estas imágenes están provistas de metadatos WCS⁴ con los que se puede obtener la ascensión recta y declinación del cuerpo observado. De esta forma, utilizando la librería astropy⁵, es posible obtener directamente el vector de observación en el sistema de referencia J2000 y, a partir de ahí, operar tal y como se ha explicado en las funciones de navegación.

2.3.1. Método de navegación

Con la herramienta Elkano descrita, es momento de detallar el método realizado para la navegación de las imágenes tomadas por el HST de Neptuno. En este trabajo, una imagen se considerará navegada cuando se disponga de la siguiente información para cada píxel del disco del planeta:

- Latitud planetocéntrica (φ).
- Longitud respecto al meridiano central (λ_{CM}).
- Coseno del ángulo de emisión (μ) .
- Coseno del ángulo de incidencia (μ_0) .
- Diferencia en ángulo acimutal $(\Delta \varphi)$.

Obtención de longitudes respecto al meridiano central

Comenzando por las coordenadas en latitud y longitud, la latitud planetocéntrica se obtendrá directamente a través de la navegación realizada con Elkano. Sin embargo, en cuanto a la longitud, será necesario establecer una lógica para obtener la longitud respecto al meridiano central, pues la navegación directa proporciona la longitud planetocéntrica.

Una vez realizada la navegación, es posible obtener de forma rápida con Elkano la longitud del meridiano central l_c , que será un atributo del objeto *navigate* resultante. Obtenida esta longitud, el razonamiento realizado para convertir la longitud planetocéntrica λ de un punto a longitud respecto al meridiano central λ_{CM} se basa en los siguientes pasos:

- 1) Comprobar si $l_c \ge 0$ o $l_c < 0$ para tener en cuenta los signos.
- 2) Comprobar si $l_c \ge 90$ o $l_c \ge -90$ para conocer si se produce el cambio de $\lambda = 180^{\circ}$ a $\lambda = -180^{\circ}$ o viceversa.

 $[\]frac{4}{2}$ World Coordinate System

 $^{^{5}}$ http://www.astropy.org

- **3)** Comprobar si $\lambda \ge 0$ o $\lambda < 0$.
- 4) Operar según el caso.

Se tienen entonces cuatro casos:

• Caso 1: $l_c \ge 0$ y $l_c \ge 90 \begin{cases} \lambda \ge 0: \lambda_{CM} = \lambda - l_c \\ \lambda < 0: \lambda_{CM} = (180 + \lambda) + (180 - l_c) \end{cases}$ • Caso 2: $l_c \ge 0$ y $l_c < 90 \begin{cases} \lambda \ge 0: \lambda_{CM} = \lambda - l_c \\ \lambda < 0: \lambda_{CM} = \lambda - l_c \end{cases}$

• Caso 3:
$$l_c < 0$$
 y $l_c \ge -90$: $\lambda_{CM} = \lambda - l_c$

• Caso 4:
$$l_c < 0$$
 y $l_c < -90 \begin{cases} \lambda \ge 0: \lambda_{CM} = -(180 - \lambda) - (180 + l_c) \\ \lambda < 0: \lambda - l_c \end{cases}$

Para ilustrar y comprender en profundidad cada caso, se presenta en la siguiente figura un ejemplo de cada uno de ellos de forma esquemática.



Figura 9: Ejemplos del cálculo de la longitud respecto al meridiano central.

Obtención de ángulos

En función de la posición relativa del Sol, el planeta, el observador y cada punto, se definen una serie de ángulos que deben ser calculados en la navegación de cada imagen.

El ángulo de emisión en un punto se define como el ángulo que forma la línea que une el centro del planeta con el punto y la línea que une el centro del planeta con el observador. Por otro lado, el ángulo de incidencia en un punto se define como el ángulo que forma la línea que une el Sol con el planeta y la línea que une el centro del planeta con el punto.

Elkano utiliza SPICE para calcular los vectores que forman esta geometría y a partir de ellos se pueden calcular de forma sencilla ambos ángulos. En concreto, los vectores que proporciona Elkano tras la navegación son:

- Vector de observación (nav.obs_vec): une el centro del planeta con la cámara.
- Vector solar (*nav.sun_vec*): une el centro del planeta con el Sol.
- Vector del punto (*nav.p.xyz*): une el centro del planeta con el punto observado.



Figura 10: Ángulos de incidencia y emisión con Elkano.

Tomando el vector de observación, el vector solar y el vector asociado a cada punto, se puede utilizar el módulo interno de geometría de Elkano para obtener rápidamente los ángulos de incidencia y emisión. Calculando el coseno de ambos ángulos, se obtienen μ y μ_0 :

$$\mu = \cos(\angle(nav.p.xyz, nav.obs_vec)) \tag{3}$$

$$\mu_0 = \cos(\angle(nav.p.xyz, nav.sun_vec)) \tag{4}$$

La diferencia en ángulo acimutal, $\Delta \varphi$, se puede obtener analíticamente a partir de μ, μ_0 y el ángulo de fase, siguiendo la siguiente expresión:

$$\Delta \varphi = \frac{\mu \cdot \mu_0 - \cos(\alpha)}{\sqrt{1 - \mu^2} \cdot \sqrt{1 - \mu_0^2}}$$
(5)

Donde α es el ángulo de fase, que se puede conseguir fácilmente calculando el ángulo entre el vector de observación y el vector solar.

Formato de las imágenes navegadas

Detallado ya cómo se calculan los parámetros de navegación para cada punto del planeta en la imagen, será necesario especificar un formato para las imágenes navegadas.

Las imágenes utilizadas en este trabajo son de tipo FITS⁶, que permiten almacenar información en diferentes extensiones o capas con diversos formatos. Aprovechando esto, se generará una extensión con las mismas dimensiones que las imágenes originales por cada parámetro de navegación, de forma que cada píxel de la imagen tenga asociado un píxel en cada una de las extensiones. Aquellos píxeles que estén fuera del disco del planeta tendrán asociado un valor nulo (NaN) en todos los parámetros de la navegación.



Figura 11: Formato de las imágenes navegadas.

Se presenta a continuación un diagrama de flujo que resume el funcionamiento del método de navegación.



Figura 12: Método de navegación.

La imagen, sin embargo, no se recorrerá en su totalidad, ya que la mayoría de los píxeles estarán fuera del disco del planeta y no habrá que operar con ellos. En su lugar, se calculará el punto sub-observador que se encontrará, aproximadamente, en el centro del disco del planeta y, con centro en este punto, se tomará un cuadrado de 5 segundos de arco de forma que incluya al planeta. Será este cuadrado el que se recorra en lugar de la imagen completa.

Por otro lado, tras el proceso de navegación ha sido necesario aplicar un algoritmo de *limb-fitting* a todas las imágenes que corrigiese una pequeña desviación sistemática que existe en el cálculo de la posición del planeta. Este algoritmo no ha sido diseñado en

 $^{^{6}\}mathrm{Flexible}$ Image Transport System

este trabajo sino que ha sido proporcionado directamente por Jorge Hernández Bernal, autor de Elkano.



Figura 13: Cuadrado a recorrer en la navegación.

2.4. Calibración fotométrica

La segunda forma en la que las imágenes fotométricas tomadas por el telescopio espacial Hubble deben ser manipuladas es mediante la calibración fotométrica. Esto no implica perder la información de cantidad de luz recibida en cada píxel sino convertirla en magnitudes físicas que puedan ser utilizados posteriormente en los análisis y modelos de la atmósfera del planeta.

2.4.1. Método de calibración

En las imágenes originales, las unidades físicas en las que se almacena la información en cada píxel son electrones/s. Sin embargo, en términos fotométricos, se suele trabajar en unidades del parámetro adimensional I/F, donde I es la intensidad reflejada y πF es la densidad de flujo solar a la distancia del planeta.

Antes de especificar el proceso seguido para la calibración de las imágenes, es importante definir los conceptos de ángulo sólido y densidad de flujo.

El ángulo sólido es la magnitud análoga al ángulo plano en el espacio. Si una superficie es vista por un observador puntual, el ángulo sólido se correspondería con la zona del espacio limitada por las rectas proyectantes desde el objeto hacia el observador. Si el objeto tiene una superficie S y está situado a una distancia r del observador, el ángulo sólido se calcula proyectando el objeto sobre una esfera de radio r y viene dado por la siguiente expresión:

$$\Omega = \frac{S}{r^2} \tag{6}$$

La unidad del ángulo sólido en el S.I es el esterorradián (sr) y se define mediante una esfera de radio unidad. Si el área de una porción de la esfera es r^2 , un esterorradián

será el ángulo sólido comprendido entre el centro de la esfera y dicha porción de la esfera.

La densidad de flujo o irradiancia se define como la potencia por unidad de área que se recibe de una fuente de radiación electromagnética. En el caso que se abarca en este trabajo, dicha fuente será, lógicamente, el Sol. Para calcular la densidad de flujo solar que recibe un planeta habrá que tener en cuenta la distancia a la que se encuentra del Sol de la siguiente forma:

$$F_p = \frac{R_{\odot}^2}{r^2} F_{\odot},\tag{7}$$

donde r es la distancia del Sol al planeta, R_{\odot} es el radio del Sol y F_{\odot} es la densidad de flujo del Sol.

Con ambas magnitudes detalladas, se puede ahora definir el parámetro I/F en el que se van a expresar todas las intensidades de las imágenes de la siguiente forma (de Pater et al., 2010):

$$\frac{I}{F} = \frac{r^2}{\Omega} \frac{F_p}{F_{\odot}},\tag{8}$$

donde Ω es el ángulo sólido subtendido por el planeta desde el detector y F_{\odot} y F_p son las densidades de flujo solar y la recibida en el planeta, respectivamente.

Cada imagen calibrada tendrá asociada un filtro astronómico que deberá ser considerado en el proceso de calibración fotométrica. El espectro solar utilizado en la Ec. (8) se ha extraído de Colina et al. (1996) y, para cada imagen, se ha convolucionado con su respectivo filtro.

Además, las imágenes tomadas por el HST cuentan con una serie de metadatos que resultan muy útiles para el proceso de calibración y que, por tanto, serán los empleados en este trabajo para la calibración de las imágenes de Neptuno. Los dos parámetros que se utilizarán son la sensibilidad inversa (PHOTFLAM) y la escala de los píxeles en segundos de arco (D001ISCL) cuyas unidades son:

$$[PHOTFLAM] = erg \cdot e^{-1} \cdot cm^{-2} \cdot A^{-1} \tag{9}$$

$$[D001ISCL] = \operatorname{arcsec} \cdot \operatorname{pix}^{-1} \tag{10}$$

La conversión de las imágenes originales (data) a imágenes con datos calibrados (ref data) pasará únicamente por dos pasos:

$$datarad = data \cdot \frac{PHOTFLAM}{(D001ISCL \cdot \frac{\pi}{3600 \cdot 180})^2}$$
(11)

$$refdata = \pi \cdot \frac{datarad}{cfilter},$$
 (12)

donde cfilter es el resultado de la convolución del filtro de la imagen con el espectro solar a la distancia a la que se encuentra Neptuno.

Una vez calibradas fotométricamente todas las imágenes, será necesario comprobar que el método es consistente temporalmente y, también, la existencia de posibles errores de calibración. Esto se realizará de dos formas distintas: mediante cortes fotométricos y mediante el cálculo del albedo geométrico.

2.4.2. Cortes fotométricos

La navegación de las imágenes permite cambiar la proyección de las mismas, pudiéndose obtener un planisferio cuyo eje horizontal recoja la longitud respecto al meridiano central y cuyo eje vertical recoja la latitud planetocéntrica de cada uno de los píxeles.

Dichos planisferios se pueden generar, en esencia, a través de una interpolación de las extensiones de longitud y latitud creadas con la navegación, así como de los datos en I/F generados con la calibración, a una rejilla equiespaciada con una resolución a especificar.



Figura 14: Creación de planisferios.

Un corte fotométrico sobre un disco planetario es una representación del valor de I/F asociado a cada longitud o latitud, en función de si se realiza sobre un paralelo o sobre un meridiano, respectivamente. Es este cambio de proyección a planisferio el que permite realizar los cortes fotométricos, cruciales para detectar posibles fallos en la calibración, así como para el análisis de las imágenes, de una forma sencilla.



Figura 15: Cortes fotométricos sobre un planisferio.

Los cortes fotométricos a través de un paralelo y un meridiano de forma esquemática se pueden observar en la siguiente figura:



Figura 16: Corte fotométrico paralelo.



La forma de las curvas dependerá, lógicamente, de la imagen y, sobre todo, del filtro utilizado. Sin embargo, algo que deben cumplir estas curvas es que deben ser muy similares entre sí cuando se trata de imágenes con el mismo filtro astronómico.

Observando la evolución a gran escala de estos cortes es posible llegar a detectar comportamientos anómalos y, en consecuencia, fallos en el proceso de calibración fotométrica.

2.4.3. Cálculo del albedo geométrico

Cuando la radiación procedente del Sol alcanza a los planetas no toda la potencia que reciben es absorbida porque parte de esta es reflejada.

Si la potencia interceptada por un planeta de radio R_p a una distancia r del Sol (L_{\odot}) viene dada por:

$$L_p = \frac{L_{\odot}}{4\pi r^2} \pi R_p^2 \tag{13}$$

el albedo de Bond A_B es la relación entre la potencia reflejada y la potencia interceptada (Sánchez-Lavega, 2011):

$$L_{refl} = A_B L_p \tag{14}$$

Si se considera ahora que la radiación es reflejada de forma anisótropa, el flujo observado de un planeta que está siendo observado a una distancia Δ_{EP} vendrá dado por:

$$F_{obs} = C_{\alpha} \Phi(\alpha) \frac{L_{refl}}{4\pi \Delta_{EP}^2},\tag{15}$$

donde $C_{\alpha}\Phi(\alpha)$ actúa como factor de corrección que depende del ángulo de fase α .

El albedo de Bond se puede expresar entonces en función de la integral de la fase q_{α} y el albedo geométrico p_0 sigue la siguiente expresión:

$$p_0 = \frac{r^2 F_{obs}(\alpha = 0^\circ)}{S_{\odot Earth}},\tag{16}$$

siendo $S_{\odot Earth} = \frac{L_{\odot}}{4\pi r^2}$ el flujo solar que recibe la Tierra, donde se asume que se sitúa el observador.

El albedo geométrico representa en consecuencia la relación entre la radiación reflejada respecto a una superficie Lambertiana, que es un reflector perfecto a cualquier longitud de onda.

Para calcular el albedo geométrico en las imágenes de Neptuno se utilizarán los planisferios generados y se calculará la media ponderada del valor I/F del todos los píxeles, teniendo como peso cada píxel el producto del ángulo de emisión μ y el ángulo de incidencia μ_0 .

La manera en la que el cálculo del albedo geométrico de las imágenes de Neptuno permite verificar que la calibración fotométrica se ha realizado correctamente pasa por comparar el albedo geométrico obtenido para cada filtro y cada visita con un espectro del albedo de disco completo de referencia conocido como espectro de Karkoschka.

Erich Karkoschka obtuvo en 1993 el espectro de los planetas gigantes (y Titán) con una resolución de 1nm en un rango espectral desde los 300nm hasta 1 μ m (Karkoschka, 1994). Dado la coincidencia en rango espectral y el cuidado con el que aquellos espectros fueron obtenidos, se utilizan muy a menudo como referencia para validar la fotometría obtenida por otras fuentes, particularmente por el HST. En la siguiente figura se muestra una representación del espectro de Karkoschka con las especificaciones de cada filtro utilizado superpuestas, donde se aprecia cómo los filtros empleados coinciden con las bandas de absorción más importantes que se pueden distinguir en el espectro planetario, o con los continuos adyacentes. Cuando el albedo geométrico de los planisferios por filtro y visita esté calculado, se deberá analizar la bondad del ajuste de los resultados al espectro de Karkoschka.



Figura 18: Espectro de Karkoschka de Neptuno (1993) y filtros astronómicos.

3. Modelos de Transporte Radiativo

En esta sección se darán, en primer lugar, unas pinceladas a la teoría de transporte radiativo para que sirvan como contexto teórico a la utilización de herramientas como *Planetary Spectrum Generator*, cuyo funcionamiento será descrito en profundidad, para la generación de modelos atmosféricos.

Por otro lado, se presentará el concepto de problema inverso y como su resolución (o *retrieval*) puede ser abordada mediante técnicas numéricas como Nelder-Mead o de inferencia bayesiana, de las cuáles se hará una revisión hasta llegar a MultiNest, la herramienta utilizada en este trabajo para la estimación de parámetros atmosféricos.

3.1. Fundamento teórico

Para comprender en profundidad las herramientas utilizadas en la generación de modelos de transporte radiativo que se aplicarán a la atmósfera de Neptuno es necesario establecer la base teórica que rige los fenómenos físicos implicados.

La teoría del transporte radiativo permite estudiar la interacción de las ondas electromagnéticas procedentes de una estrella con la atmósfera de un planeta o, de una forma más genérica, de cualquier radiación electromagnética con la materia. Las atmósferas planetarias actúan como medios gaseosos en los que la luz puede sufrir tres procesos diferentes: emisión, absorción o difusión (o *scattering*) (Sánchez-Lavega, 2011).

El primer proceso consiste en la emisión de radiación electromagnética por parte de gases y partículas atmosféricas. Cuando la energía de la radiación incidente es suficientemente alta como para alterar el nivel de energía de los átomos presentes en las moléculas sensibles a esta radiación, se producirá la emisión de fotones. La emisión viene caracterizada por el coeficiente másico de emisión j_{ν} .

El segundo proceso consiste en la absorción de parte de la radiación electromagnética por parte de gases y partículas atmosféricas y viene caracterizado por el coeficiente másico de absorción k_{ν} que está relacionado con el número de colisiones que se producen entre los elementos de los gases que ocurren durante la absorción o emisión de fotones (Sánchez-Lavega, 2011).

El ultimo proceso es fruto de la interacción de la luz tanto con gases como con partículas atmosféricas. En función del tamaño de la partícula comparado con la longitud de onda de la radiación incidente, se puede hablar de *scattering* de Rayleigh (partículas pequeñas), producido por las moléculas de hidrógeno y helio en el caso de Neptuno, o *scattering* de Mie (partículas esféricas). En ambos casos, se produce una dispersión de la luz en unas direcciones concretas, con alta dependencia angular y también espectral, muy acusada para el caso del *scattering* de Rayleigh. Este proceso también lleva asociado un coeficiente másico σ_{ν} .

Los fenómenos de *scattering* pueden llegar a ser extremadamente complejos, pudiéndose hablar de *single scattering* cuando las propiedades del medio hacen que los procesos de dispersión sean muy escasos o de *scattering* múltiple cuando la luz sufre dispersión numerosas veces en las partículas. La suma de los coeficientes másicos de absorción y *scattering* conforman el coeficiente másico de extinción $\alpha_{\nu} = k_{\nu} + \sigma_{\nu}$, con el que, junto a la densidad ρ , se puede expresar el espesor óptico del medio:

$$\tau_{\nu} = \int_0^\infty \alpha_{\nu}(l)\rho(l)dl \tag{17}$$

Se considerará que el medio es ópticamente fino, donde la luz viaja casi libremente, sin apenas atenuación, cuando $\tau_{\nu} < 1$ y ópticamente grueso, donde el haz de luz se ve atenuado tanto más cuanto mayor sea el espesor óptico, cuando $\tau_{\nu} \ge 1$.

La ecuación que gobierna el transporte radiativo no es más que la aplicación de la conservación de la energía a un volumen gobernado por la absorción, emisión y scattering de fotones. Con el balance entre los procesos de extinción y de emisión, el cambio de intensidad dI_{ν} a lo largo de un camino dl viene dado por la siguiente expresión (Sánchez-Lavega, 2011):

$$\frac{dI_{\nu}}{dl} = j_{\nu}\rho - I_{\nu}\alpha_{\nu}\rho \tag{18}$$

Si se considera que el camino óptico está en la dirección normal a la superficie, la ecuación de transporte radiativo se puede expresar en función del coseno del ángulo de emisión $\cos\varphi = \mu_{\varphi}$ y de una función fuente S_{ν} que introduce los efectos de la propia emisión del medio:

$$\mu_{\varphi}\frac{dI_{\nu}}{d\tau_{\nu}} = S_{\nu} - I_{\nu} \tag{19}$$

Donde la función fuente viene definida por los coeficientes másicos de emisión y extinción:

$$S_{\nu} = \frac{j_{\nu}}{\alpha_{\nu}} \tag{20}$$

La resolución de la compacta Ec. (18) no es en absoluto sencilla, pues, requiere de la consideración de un gran número de factores que intervienen en la interacción de la radiación electromagnética con los gases y partículas atmosféricas, así como en el establecimiento de unas condiciones de contorno, que a menudo son insuficientes para obtener una única solución. Existen, sin embargo, modelos simplificados que permiten entender el comportamiento de esta teoría en condiciones sencillas.

Atmósfera puramente absorbente

En el caso más sencillo, en una atmósfera puramente absorbente, no se produce emisión de radiación electromagnética y, por tanto, la función fuente será nula S_{ν} y el coeficiente de extinción coincidirá con el coeficiente de absorción $\alpha_{\nu} = k_{\nu}$. La evolución de la intensidad seguirá entonces lo que se conoce como Ley de Lambert simplificada (Sánchez-Lavega, 2011):

$$I_{\nu}(\tau_{\nu}) = I_{\nu}(0)e^{-\tau_{\nu}}$$
(21)

Si el medio es ópticamente fino ($\tau_{\nu} \ll 1$), se puede hacer un desarrollo en serie y demostrar que I_{ν} decrecerá linealmente con el espesor óptico: $I_{\nu}(\tau_{\nu}) \approx I_{\nu}(0)(1-\tau_{\nu})$.

Atmósfera plano-paralela

Es habitual realizar la aproximación en la que la atmósfera, en parcelas localizadas, es plano-paralela de forma que las variaciones de intensidad y de parámetros atmosféricos ocurren solo en la dirección vertical. Si las distancias normales al plano de las capas se denotan con z, la ecuación de transporte radiativo bajo esta aproximación pasa a ser (Liou, 2002):

$$\cos\theta \frac{dI_{\nu}(z;\theta,\phi)}{k_{\nu}\rho dz} = -I_{\nu}(z;\theta,\phi) + J_{\nu}(z;\theta,\phi), \qquad (22)$$

donde los ángulos θ y ϕ están definidos según la siguiente figura:



Figura 19: Geometría de atmósfera plano-paralela. Imagen extraída de Liou (2002).

Si se introduce el espesor óptico en la dirección normal

$$\tau_{\nu} = \int_{z}^{\infty} k_{\nu} \rho dz' \tag{23}$$

y se toma el coseno del ángulo θ como $\mu = \cos \theta$, la Ec. (22) se puede expresar como:

$$\mu \frac{dI_{\nu}(\tau;\mu,\phi)}{d\tau} = -I_{\nu}(\tau;\mu,\phi) + J_{\nu}(\tau;\mu,\phi)$$
(24)

Esta es una expresión de la ecuación integro-diferencial básica para el problema de *scattering* múltiple en atmósferas plano-paralelas. Para resolverla, tradicionalmente se adoptan diferencias finitas e integrales por cuadraturas, de forma que se transforma en un conjunto de ecuaciones lineales y en ocasiones admiten resoluciones algebraicas incluso analíticas (Chandrasekhar, 2013).

Queda en evidencia la complejidad conceptual y matemática que existe tras la teoría de transporte radiativo que tan útil puede resultar para estudiar en profundidad las atmósferas planetarias. Es por eso que es necesario utilizar herramientas de cálculo avanzadas que permitan trabajar numéricamente con estos procesos. La herramienta que se utilizará en este trabajo será el Planetary Spectrum Generator.

3.2. Planetary Spectrum Generator

El Planetary Spectrum Generator es una herramienta disponible tanto en formato online como instalable localmente desarrollada por un equipo del Goddard Space Flight Center de la NASA cuyo investigador principal es Gerónimo Villanueva. Este útil permite generar espectros planetarios en un rango espectral muy amplio que abarca desde los 50nm hasta los 100mm, para diferentes cuerpos del sistema solar, simulando las geometrías correspondientes desde diferentes observatorios (terrestres o espaciales), orbitadores o incluso landers (Villanueva et al., 2018) De esta forma, esta herramienta es de gran utilidad a la hora de interpretar y comprender los datos recibidos por misiones espaciales o para planear futuras observaciones o conceptos de instrumentos y misiones (Roy-Pérez, 2021). Además, también se emplea como herramienta didáctica para mostrar rápidamente las observaciones que se pueden obtener desde un buen número de situaciones reales.

La interfaz de trabajo con PSG más sencilla e interactiva es a través de la página web de la herramienta⁷ en la que se pueden definir los parámetros principales del modelo, así como observar los espectros calculados, abundancias de compuestos atmosféricos y perfiles verticales de temperatura y presión. Internamente, la interfaz *online* de PSG trabaja con ficheros en formato XML⁸, un metalenguaje que permite intercambiar datos mediante la creación de etiquetas y cuya fácil manipulación supone una ventaja para trabajar sobre ellos con otros lenguajes de programación como Python. Estos ficheros están divididos en tres campos de parámetros con los que se definen los modelos que utiliza PSG: 'Objeto y Geometría', 'Atmósfera y Superficie' e 'Instrumento'.

El campo 'Objeto y Geometría' permite definir el cuerpo celeste con el que se va a trabajar, modificar sus propiedades físicas (diámetro, densidad, periodo, temperatura de su estrella, etcétera), así como especificar la geometría de observación. Para esta última, se puede optar entre diferentes opciones catalogadas como, por ejemplo, 'observatorio', 'nadir', 'limbo', 'ocultación' y 'looking up'. Además, para planetas como la Tierra o Marte de los que se tienen muchos datos atmosféricos, modificar la fecha de observación afecta al estado meteorológico que se estima con modelos de circulación global que son cargados desde simulaciones precalculadas y almacenadas en el propio servidor.



Figura 20: Geometrías de observación de PSG. Imagen extraída de Villanueva et al. (2018).

⁷https://psg.gsfc.nasa.gov/

⁸eXtensible Markup Language

El campo 'Atmósfera y Superficie' supone el eje central en cuanto al estudio de la atmósfera del cuerpo seleccionado en el campo anterior. Aquí se define un perfil vertical de presión y temperatura en 50 capas, así como la abundancia de gases y aerosoles, que serán los responsables de introducir fenómenos de *scattering* o *scattering* múltiple. Además, se puede especificar si la atmósfera se encuentra en equilibrio hidrostático o fijar un tipo de atmósfera que siga modelos de circulación general como el modelo GEM de Marte (Nearly y Daerden, 2018) o el modelo de Parmentier para gigantes gaseosos (Parmentier y Guillot, 2014). Algunos de los parámetros introducidos en este campo son aún desconocidos y serán los que se pretenderán estimar con las técnicas de *retrieval* que se especificarán en los siguientes apartados.

El último campo, 'Instrumento', permite especificar el rango espectral a utilizar, la resolución del instrumento simulado, las unidades en las que se va a generar el espectro y el ruido que se introduce en la detección. Por supuesto, PSG permite seleccionar instrumentos reales como ALMA, ExoMARS, Keck, JWST o HST, que será el utilizado en este trabajo. De esta forma, las simulaciones pueden relacionarse directamente con las observaciones.



Figura 21: Arquitectura de los módulos principales de PSG. Imagen extraída de Villanueva et al. (2022).

Trabajar con PSG a través de su interfaz web permite dar formato al fichero de configuración del modelo atmosférico de una forma intuitiva e interactiva. Sin embargo, a la hora de operar con este tipo de ficheros, modificando parámetros concretos, sin tener que generar un nuevo fichero cada vez (como se tendría que hacer con la interfaz web), es necesario utilizar un método más eficaz y rápido, a través de lenguajes de programación. PSG incluye una API⁹ que permite trabajar con PSG de forma remota enviando ficheros de configuración a los servidores donde se generarán los espectros. De esta forma, el usuario no necesita instalar o actualizar los modelos de transporte radiativo en su máquina (Villanueva et al., 2022).

La implementación de esta API en Python fue realizada por Asier Munguira en su Trabajo de Fin de Máster (Munguira, 2020) y, en base a este, se presenta en este trabajo una breve introducción al funcionamiento de dicha implementación pues será la que se utilice en las tareas de modelización.

La librería *subprocess* de Python juega un papel fundamental pues es la que permite la comunicación con la API de PSG, ejecutando una línea de comando en una terminal de la máquina local y capturando la salida. En esencia, la API envía un fichero de configuración XML (generado previamente) al servidor de PSG, donde se ejecutan las simulaciones. La salida del servidor remoto se recoge posteriormente y se copia localmente para su manipulación. Se presenta en la siguiente figura la estructura básica para generar un espectro en PSG a partir de un fichero de configuración.

```
import subprocess
configfile = 'ConfigNeptuno.txt'
CurlUrl = 'curl --data-urlencode file@' + configfile + ' https:/psg.gsfc.nasa.gov/api.php '
a = subprocess.run(CurlUrl, capture_output=True, shell=True, text=True)
salida = a.stdout
```

Figura 22: Ejemplo de llamada a la API de PSG con Python.

El uso de PSG por el usuario público es limitado debido a que los servidores reciben una gran cantidad de solicitudes de cálculo en todo el mundo, al tratarse de una herramienta con mucho potencial dentro del ámbito científico. Sin embargo, es posible superar este límite trabajando con un repositorio de PSG en Docker.

Docker¹⁰ es una herramienta que permite almacenar y compartir un código por paquetes cuya ventaja frente a una máquina virtual es la capacidad de ejecutar código simultáneamente desde diferentes arquitecturas de *hardware*. La instalación de los paquetes PSG a través de Docker está descrita en la web de PSG y, una vez que se hayan instalado correctamente, la llamada a la API se realizará utilizando otra URL, tal y como se indica en la siguiente figura.

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

Figura 23: Llamada a la API vía Docker.

Utilizar PSG mediante Docker tiene como inconveniente el gran almacenamiento requerido para alguno de los paquetes. Es por eso que en este trabajo se va a trabajar utilizando la máquina Medea del Grupo de Ciencias Planetarias de la UPV/EHU, un servidor Dell Precision T7620 con dos procesadores Intel Xeon Gold 6254 a 3.1 GHz, 384 Gb de RAM, 442 GB de Swap que permite ejecutar hasta 72 procesos en paralelo. La instalación de PSG en este servidor fue realizada por Joan Roy durante el desarrollo de su trabajo de Fin de Máster (Roy-Pérez, 2021).

⁹Application Program Interface

¹⁰https://www.docker.com/

3.3. Problema inverso: retrieval

Ante la resolución de un problema físico, existen dos grandes modalidades: problemas directos e inversos. Los primeros son aquellos en los que, a partir de unas hipótesis o modelos, se debe inferir el resultado hasta el que, a partir de unas condiciones iniciales, evoluciona el sistema. Es quizás el tipo de problema más habitual en el ámbito académico. Sin embargo, en el ámbito científico son igual de frecuentes los problemas del segundo tipo, es decir, los inversos.

Un problema inverso es aquel en el que se quiere estimar el valor que deben tomar los parámetros de un modelo para que este sea consecuente con los datos o resultados de los que se dispone. En este caso y a diferencia del problema directo, la solución puede estar sometida a degeneración, existiendo, por tanto, varios conjuntos de modelos que provocarían el mismo resultado. La resolución de estos problemas se conoce como inversión o *retrieval*.

En cuanto a este trabajo, se está sin ninguna duda ante un problema de tipo inverso. A partir de las observaciones de Neptuno tomadas por el Telescopio Espacial Hubble, se debe obtener un modelo de atmósfera que responda a las medidas de reflectividad y oscurecimiento hacia el limbo extraídas del análisis de las imágenes. Utilizando los códigos de transporte radiativo de PSG, se obtendrán modelos variando los diferentes parámetros atmosféricos que influyen en el espectro reflejado del planeta, tales como abundancias de aerosoles, espesores ópticos o tamaño de partículas, con el objetivo de hacerlos casar con los datos observacionales.

Los retrievals se basan en una comparación constante entre el modelo calculado y las observaciones. La bondad del ajuste entre modelo y observaciones se examinará mediante la desviación cuadrática media reducida o $\bar{\chi}^2$ -reducido. A partir de un conjunto de observaciones $R_0(\lambda)$, un número N de medidas y un modelo multiparamétrico que describe el sistema físico estudiado $R(\lambda, g_1, g_2, g_3, ...)$, la desviación cuadrática media reducida se define según la siguiente expresión:

$$\bar{\chi}^2 = \frac{1}{\eta} \sum_{\lambda_N}^{\lambda_0} \frac{[R_0(\lambda) - R(\lambda, g_1, g_2, g_3, ..)]^2}{\sigma_\lambda^2}$$
(25)

Donde η representa los grados de libertad del sistema, siendo $\eta = N - 1$ si únicamente se impone la ligadura de las restricciones y σ la desviación estándar (Bevington et al.,1993). De esta forma, $\bar{\chi}^2$ tendrá un valor menor cuanto mejor se ajuste el modelo a las observaciones, llegando al caso límite en el que $\bar{\chi}^2 = 0$ cuando la observación y el modelo son idénticos. Se podrá considerar que el ajuste es adecuado cuando $\bar{\chi}^2 < 1$ y las diferencias entre modelo y observaciones están dentro de las barras de error admitidas por las observaciones.

Es inmediato entonces deducir que el objetivo principal a la hora de resolver un problema inverso será conseguir el modelo que provoque el menor valor de $\bar{\chi}^2$. Esto es lo que se conoce como un problema de optimización (minimización en este caso), ampliamente utilizado no solo en el ámbito científico, sino también en el económico o político para minimizar pérdidas o riesgos. En este trabajo, se utilizará la librería *optimize* de la biblioteca $scipy^{11}$ que dispone de diferentes herramientas para abordar problemas de optimización. En concreto, la función *minimize* será la encargada de ajustar los valores de los parámetros del modelo para conseguir el menor valor de $\bar{\chi}^2$ a partir de unas condiciones iniciales. Esta función soporta varios métodos como Newton-GC, Powell o Nelder-Mead, que será el utilizado en este trabajo en conjunto con las técnicas de inferencia bayesiana que se detallan en el siguiente apartado.

El método de Nelder-Mead (Nelder y Daerden, 1965) se basa en el concepto del simplex, una hipersuperficie de m+1 vértices en un espacio m-dimensional (correspondería, por ejemplo, a un triángulo en \mathbb{R}^2 o a un tetraedro en \mathbb{R}^3) donde m representa el número de parámetros independientes del modelo. Cada vértice tendrá, por tanto, m coordenadas, cuyos valores representarán una de las posibles combinaciones de valores para los parámetros del modelo. El algoritmo calcula en cada iteración el valor de $\bar{\chi}^2$ que produce cada vértice y reevalúa aquel que produzca el mayor valor de forma que el simplex se expanda o se contraiga entorno a la imagen de este vértice respecto al punto medio del resto de vértices. Los vértices acabarán convergiendo, idealmente, en una misma región espacial, cuyo conjunto de valores para los parámetros es el que mejor se ajusta de las observaciones. Por último, cabe mencionar que este método no hace uso de los gradientes de la función durante la búsqueda de la solución óptima, lo que reduce notablemente el número de evaluaciones necesarias para la convergencia comparado con otros métodos.

Este, junto a muchos otros métodos de minimización, tiene algunas limitaciones en cuanto a la convergencia hacia la solución óptima. Una de las principales se da debido a la existencia de mínimos locales en las funciones a optimizar. Estos puntos, a pesar de tener un valor menor que su entorno, no proporcionan la solución óptima (mínima en este caso) que sí que proporcionan los mínimos absolutos. Para muchos algoritmos de minimización, un mínimo local y un mínimo absoluto pueden ser indistinguibles. Esto hace, además, que la solución dependa fuertemente de las condiciones iniciales que se le proporcionen al método. Es por eso que en este trabajo, además de utilizar el método de Nelder-Mead, se van a explorar técnicas de inferencia bayesiana que proporcionen otro abordaje a los *retrievals*.

3.4. Técnicas de inferencia bayesiana: MultiNest

Los métodos de inferencia bayesiana están ganando popularidad en cada vez más ramas de la astrofísica, desde la cosmología hasta la física de partículas, y es que estas técnicas destacan por su utilidad en dos tareas muy frecuentes en problemas físicos: la estimación de parámetros y la selección de modelos. Con el fin de dar un contexto teórico previo a la aplicación de estas técnicas en el trabajo, se va a establecer en este apartado un marco teórico resumido mediante una revisión de Feroz y Hobson (2008) y Feroz et al. (2009).

Sea para estimar parámetros o seleccionar modelos, estas técnicas se basan, tal y como su nombre indica, en el teorema de Bayes. Para la estimación de un conjunto de parámetros θ en un modelo H teniendo el conjunto de datos D, el teorema de Bayes

¹¹https://scipy.org/

establece:

$$P(\theta|D,H) = \frac{P(D|\theta,H) \cdot P(\theta|H)}{P(D|H)}$$
(26)

Donde cada término se define como:

- $P(\theta|D, H) \equiv P(\theta)$: Probabilidad a posteriori (*posterior probability*). Representa la probabilidad de que los valores de los parámetros sean los que corresponden a los datos.
- $P(D|\theta, H) \equiv L(\theta)$: Función de verosimilitud (*likelihood*). Representa la probabilidad de que se den los datos considerándose como ciertos los valores de los parámetros.
- $P(\theta|H) \equiv \pi(\theta)$: Probabilidad a priori. Representa la distribución de probabilidad de los parámetros que asumimos antes de comenzar nuestra investigación, ya sea por pura especulación o por observaciones y modelizaciones previas.
- $P(D|H) \equiv \mathcal{Z}$: Evidencia Bayesiana. Representa el sustento que entregan los datos para el modelo (Jara, 2021).

Si se asume que la función de verosimilitud $L(\theta)$ para cada punto de un conjunto de M puntos viene dada por una distribución gaussiana independiente cuya desviación estándar σ_i es conocida, $L(\theta)$ se puede definir a través de $\bar{\chi}^2$, presentada en la Ec. (25), de la siguiente forma:

$$logL = -\frac{M}{2}ln(2\pi) - ln\left(\sum_{i=1}^{M}\sigma_{i}\right) - \frac{1}{2}\bar{\chi}^{2},$$
(27)

Para el caso de la estimación de parámetros, la evidencia Bayesiana \mathcal{Z} actúa como factor de normalización y frecuentemente se desprecia pues es independiente de los parámetros θ . Sin embargo, es en la selección de modelos donde juega un papel fundamental actuando como el factor requerido para normalizar la probabilidad a posteriori sobre θ :

$$\mathcal{Z} = \int L(\theta) \pi(\theta) d^D \theta, \qquad (28)$$

donde D es la dimensionalidad del espacio de parámetros. Al actuar como la media de la función de verosimilitud sobre la probabilidad a priori, será menor cuanto más grandes sean las áreas en el espacio de parámetros con un valor bajo de verosimilitud. De esta forma, la evidencia bayesiana cumple lo que se conoce como la navaja de Occam, un principio que establece que bajo la competencia de dos teorías que cumplan la misma predicción, la más simple será la mejor. Traducido al caso que se está tratando, el modelo más simple con un espacio de parámetros compacto tendrá una mayor evidencia que uno complejo, a menos que este último se adecúe significativamente mejor a los datos.

Luego, la selección entre un modelo H_0 y otro H_1 es una cuestión de comparación entre sus probabilidades a posteriori, de tal forma que estás se relacionan con la evidencia bayesiana de la siguiente manera:

$$\frac{P(H_1|D)}{P(H_0|D)} = \frac{P(D|H_1)P(H_1)}{P(D|H_0)P(H_0)} = \frac{\mathcal{Z}_1}{\mathcal{Z}_0}\frac{P(H_1)}{P(H_0)}$$
(29)

Como $P(H_1)/P(H_0)$ es la relación entre las probabilidades a priori de los modelos (que se suelen tomar unitarias en muchos casos), queda presente la importancia de la evidencia bayesiana en la selección de modelos. Sin embargo, la evaluación de \mathcal{Z} a través de la Ec. (28) es todo un reto numérico que además requiere, al depender de $\pi(\theta)$, que el espacio de probabilidad a priori esté correctamente muestreado, incluso en regiones donde $L(\theta)$ tenga un valor bajo. Es aquí donde técnicas como Nested sampling (Skilling, 2004) entran en juego.

Nested sampling

Nested sampling es una técnica que tiene como principal objetivo la evaluación eficiente de la evidencia Bayesiana mediante la conversión de la integral multidimensional de la Ec. (28) a una integral unidimensional relacionando la función de verosimilitud y el volumen del espacio de probabilidad a priori, que se define como:

$$X(\lambda) = \int_{L(\theta) > \lambda} \pi(\theta) d^D \theta$$
(30)

Lo importante de esta expresión es que la integral se extiende sobre la región interior a la curva de iso-verosimilitud $L(\theta) = \lambda$ y que su inversa, L(X), permite obtener la evidencia bayesiana como una integral unidimensional que se puede resolver numéricamente:

$$\mathcal{Z} = \int_0^1 L(X) dX \tag{31}$$

$$\mathcal{Z} = \sum_{i=1}^{M} L_i w_i \tag{32}$$

donde w_i dependerá del método numérico de integración a utilizar y donde los valores de X_i tomados para calcular $L_i = L(X_i)$ son decrecientes.

El algoritmo *Nested sampling* sigue los siguientes pasos para realizar la suma de la Ec. (32):

- **0)** Se toman N muestras (*live points*) de la función de distribución a priori total $\pi(\theta)$ y se incluyen en una lista. El volumen inicial será por tanto $X_0 = 1$.
- 1) Se ordenan las muestras en función de la verosimilitud y la que tenga menor valor (L_0) es descartada de la lista.
- 2) Se toman muestras del volumen interior al contorno de iso-verosimilitud que formaba la descartada $(L(\theta) = L_0)$. Aquellas muestras que cumplan la condición $L > L_0$ se incluirán en la lista y se vuelve al paso 1.

De esta forma, el algoritmo recorre todo el espacio de probabilidad a priori, avanzando en cada iteración hacia zonas de mayor verosimilitud. El criterio de detención del algoritmo, presentado en Fischer et al. (2004), tiene en cuenta, en cada iteración, el valor máximo de verosimilitud de las muestras y la contribución a la estimación que hace el volumen X_i restante. Así, cuando $\Delta \mathcal{Z} = L_{máx}X_i$ no contribuya al cambio de la estimación de la evidencia en un valor por encima de un valor definido (normalmente se toma 0.1 para el logaritmo de la evidencia bayesiana), el algoritmo se detiene. En la figura 24 se puede ver un esquema representativo del funcionamiento de este algoritmo.



Figura 24: Esquema del algoritmo Nested sampling.

El principal desafío de este algoritmo se encuentra en extraer muestras de $\pi(\theta)$ de forma que cumplan la condición $L > L_0$, pues, extraer muestras arbitrarias de todo el espacio hasta que se de esta condición es muy ineficiente.

Ellipsoidal sampling

Para solucionar esto, existen métodos como el *Ellipsoidal sampling* (Mukherjee et al., 2006) que resuelven parcialmente el problema aproximando la curva de iso-verosimilitud del punto a ser sustituido (L_0) por un elipsoide de D-dimensiones (aunque alargada por un factor f que hace que esta no sea exactamente elipsoidal) que se determina con la matriz de covarianza de las muestras activas en cada iteración.

A pesar de que este método (también conocido como single ellipsoid sampling) puede ser muy efectivo para distribuciones unimodales, no está bien adaptado a distribuciones multimodales. Esto puede solucionarse con la identificación de cúmulos o clusters de los live points que estén suficientemente separados y construyendo un elipsoide para cada uno de ellos. Existen diversos algoritmos para la identificación de cúmulos como el kmeans (Pelleg y Moore, 2001), PG-means (Feng y Hamerly, 2006) o el X-means (Pelleg y Moore, 2006) que, inevitablemente, producirán que a medida que el nivel de verosimilitud vaya aumentando, los elipsoides asociados a cada cluster puedan superponerse como se puede observar en la Figura 25.


Figura 25: Comparación *single ellipsoid sampling* y elipsoides superpuestas. Imagen extraída de Feroz y Hobson (2008).

Para considerar la posibilidad de que los elipsoides se superpongan, se puede tener en cuenta el número de elipsoides n_e y únicamente aceptar las muestras con probabilidad $1/n_e$.

Simultaneous ellipsoidal sampling

Uniendo el algoritmo X-means y esta última forma de considerar las superposiciones de elipsoides nace el método *simultaneous ellipsoidal sampling*, cuyo funcionamiento en cada iteración se puede resumir en los siguientes pasos:

- 1) El conjunto de N muestras (o *live points*) se divide en K *clusters* utilizando el algoritmo X-*means*.
- 2) Se calcula la matriz de covarianza de los puntos de cada *cluster* y se construye el elipsoide que los envuelve (además de alargarlo con un factor f_i , k). Se construyen, por tanto, K elipsoides.
- 3) El punto con menor verosimilitud (L_i) se descarta y se sustituye por otro punto extraido del conjunto de elipsoides, teniendo en cuenta las posibles superposiciones.

MultiNest

Basado en el anterior algoritmo surge MultiNest (Feroz et al., 2009), que pretende incorporar numerosas mejoras como, por ejemplo, un nuevo método para construir los elipsoides, consiguiendo superar al anterior en robustez y eficiencia, además de adaptarse a problemas degenerados, manteniendo la capacidad de trabajar con elipsoides superpuestos y distribuciones multimodales.

La explicación de este nuevo algoritmo para clasificar los *live points* en *clusters* y construir los elipsoides extendería demasiado la longitud de este apartado, así que se van a especificar únicamente los detalles más significativos.

Para el funcionamiento del algoritmo se requiere que las muestras estén uniformemente distribuidas en el espacio de parámetros. Con este objetivo, MultiNest tiene como espacio original un hipercubo unidad de D dimensiones en el que el valor de los parámetros varía de 0 a 1 y en el que se construirán los elipsoides. De esta forma, será necesaria una conversión del espacio 'físico' de los parámetros al hipercubo unidad, a menos que la función de probabilidad a priori $\pi(\theta)$ sea uniforme (tal y como se tomará en este trabajo), en cuyo caso ambos espacios, 'físico' e hipercubo unidad, coinciden.

En este trabajo, este será el algoritmo que se utilice tanto para la estimación de los parámetros como para la selección de modelos (o, al menos, para inferir la evidencia bayesiana de los modelos que se realicen).

La implementación se realizará a través de la librería PyMultiNest¹² que permite crear un objeto de tipo MultiNest en el que definir: la función de probabilidad a priori, el cálculo de la verosimilitud, el modelo a utilizar, los parámetros a utilizar y sus valores límite, el número de *live points* y el valor a utilizar en el criterio de detención.

Ejecutar el método MultiNest con esta librería, tras las pertinentes definiciones, se reduce a una sola línea de código como muestra la figura 26.



Por último, con el conocimiento de la alta carga conceptual y teórica de este apartado, se presentan a continuación los puntos más relevantes de la misma en relación a este trabajo:

- La evidencia bayesiana \mathcal{Z} juega un papel fundamental para la selección de modelos.
- Un modelo simple con un conjunto de parámetros acotado tendrá mayor evidencia bayesiana que un modelo más complejo a menos que este último se adecúe significativamente mejor a los datos.
- La evaluación de la evidencia bayesiana de forma eficiente es un problema complejo para el que existen diferentes algoritmos con diversos abordajes.
- MultiNest es el método más completo y el que se aplicará en este trabajo para la resolución de los *retrieval* pues:
 - Permite estimar la probabilidad a posteriori de los parámetros de un modelo.
 - Permite estimar la evidencia bayesiana de un modelo para su posterior comparación con otros disponibles.
 - Recorre el espacio completo de parámetros en lugar de tener dependencia de los valores iniciales a priori de los mismos.
 - Permite observar correlación entre la probabilidad a posteriori de parámetros dos a dos.
 - Tiene una sencilla implementación en Python a través de la librería PyMulti-Nest. Esta librería tiene un tiempo de ejecución menor que el resto de códigos pues MultiNest no está escrito a bajo nivel en Python, compensando que el algoritmo sea más lento que los clásicos Monte-Carlo Markov Chain (como los de la librería EMCEE¹³).

¹²https://johannesbuchner.github.io/PyMultiNest/

¹³https://emcee.readthedocs.io/en/stable/

De nuevo, toda la información mostrada en este apartado está basada en una revisión y resumen de Feroz y Hobson (2008) y Feroz et al. (2009).

4. Resultados

En esta sección se mostrarán los resultados de la navegación y la calibración de las imágenes, la creación de modelos de transporte radiativo con PSG y los *retrieval* con Nelder-Mead y MultiNest. Además, se extaerán algunas conclusiones específicas de estos resultados en búsqueda de una explicación física de los mismos.

4.1. Navegación

Una vez se tenían las imágenes de Neptuno tomadas por el HST dentro del programa OPAL (y otras que utilizan filtros distintos a los del programa), lo principal era conseguir asignar a cada píxel una latitud y una longitud. De esta forma, se podrían ubicar los distintos fenómenos que se pudiesen detectar en la atmósfera del planeta.

La descripción del método de navegación, realizada en la sección 2.3.1, incluye todos los detalles de la versión final del mismo, que surgen de una serie de numerosas modificaciones y pruebas realizadas con las imágenes. Con las mismas, se consiguió desarrollar un método para obtener la longitud respecto al meridiano central de cualquier imagen sea cual sea la posición relativa entre el planeta y el HST, además de disminuir el tiempo de ejecución reduciendo el área de la imagen a recorrer (Figura 13).

Cuando se concluyó que el método era efectivo para cualquier filtro y visita, se aplicó de forma masiva a todas las imágenes disponibles de Neptuno, tomadas por el Telescopio Espacial Hubble entre 2015 y 2022, bajo el programa OPAL. Sin embargo, dentro del conjunto de imágenes, no todas pudieron ser navegadas, no por incapacidad del método, sino por la existencia de imágenes defectuosas en las que el disco del planeta aparecía difuminado o directamente no aparecía.

Se presentan a continuación unas tablas resumen del número de imágenes navegadas por filtro y visita en función del total de imágenes disponibles incluyendo a las defectuosas (el formato de cada celda es imágenes navegadas / total de imágenes):

Filtro/Visita	2015-09-01	2015-09-18	2016-05-15	2016-10-03	2017-10-06	2018-09-09
F336W	2/2	0	4/4	0	0	0
F467M	2/2	12/16	24/24	16/16	18/18	11/16
F547M	2/2	12/16	24/24	16/16	18/18	11/16
F631N	2/2	0	0	0	0	0
F763M	2/2	12/16	16/16	16/16	18/18	11/16
F845M	2/2	24/32	0	32/32	36/36	11/16
F953M	2/2	0	0	0	0	0
FQ619N	2/2	12/16	0	16/16	18/18	0/16
FQ889N	2/2	0	0	0	0	0
FQ937N	2/2	0	0	0	0	0
FQ750N	2/2	0	0	0	0	0
FQ727N	2/2	12/16	8/8	16/16	18/18	10/16
F657N	0	12/16	0	16/16	18/18	11/16
F390M	0	0	4/4	0	0	0
F410M	0	0	4/4	0	0	0

Filtro/Visita	2018-11-05	2019-09-28	2020-01-07	2020-08-19	2020-12-12	2021-09-06
F336W	0	0	0	0	0	0
F467M	16/16	16/32	40/40	14/16	131/140	16/16
F547M	16/16	16/32	10/10	14/16	28/30	16/16
F631N	0	0	0	0	0	0
F763M	16/16	16/32	20/20	14/16	0	15/16
F845M	16/16	16/16	20/20	14/16	36/40	16/16
F953M	0	0	0	0	0	0
FQ619N	8/16	16/16	10/10	14/16	0	12/16
FQ889N	0	0	0	0	0	0
FQ937N	0	0	0	0	0	0
FQ750N	0	0	0	0	0	0
FQ727N	16/16	16/16	0	14/16	0	12/16
F657N	16/16	16/32	0	14/16	0	15/16
F390M	0	0	0	0	36/40	0
F410M	0	0	0	0	0	0

Filtro/Visita	2022-01-05	2022-05-29	2022-09-19
F336W	0	0	0
F467M	55/55	54/54	12/16
F547M	20/20	20/20	12/16
F631N	0	0	0
F763M	0	0	12/16
F845M	15/15	15/15	12/16
F953M	0	0	0
FQ619N	0	0	11/15
FQ889N	0	0	0
FQ937N	0	0	0
FQ750N	0	0	0
FQ727N	0	0	12/16
F657N	0	0	12/16
F390M	20/20	20/20	0
F410M	0	0	0

Como se puede observar, se tienen más filtros disponibles que aquellos incluidos en el programa OPAL, sobre todo en las primeras visitas, cercanas al inicio de este programa. De un total de 1812 imágenes, 1590 han podido ser navegadas. Esto asegura que, por cada visita, se han navegado prácticamente todas las imágenes disponibles. Por otro lado, por cada filtro, cerca del total de imágenes han podido ser navegadas en todos los casos.

Pasando al formato resultante de las imágenes navegadas, se ha generado un archivo FITS nuevo por cada imagen original, siguiendo el formato establecido en el apartado 2.3.1, de forma que las extensiones de cada fichero navegado resultan tal y como se muestra en la siguiente figura:

No.	Name	Ver	Туре	Cards	Dimensions	Format
0	PRIMARY	1	PrimaryHDU	797	()	
1	CAL	1	ImageHDU	8	(543, 514)	float32
2	LAT	1	ImageHDU	8	(543, 514)	float64
3	LON	1	ImageHDU	8	(543, 514)	float64
4	MU	1	ImageHDU	8	(543, 514)	float64
5	MUØ	1	ImageHDU	8	(543, 514)	float64
6	DPHI	1	ImageHDU	8	(543, 514)	float64

Figura 27: Formato archivo imagen navegada.

La extensión 1 contiene ya la imagen calibrada fotométricamente de la forma que se explicó en el apartado 2.4.

Por cada una de las imágenes navegadas, se puede representar una rejilla de paralelos y meridianos superpuesta al disco del planeta que ilustra el resultado de la navegación de forma rápida:



Figura 28: Rejilla de navegación (F467M).

A pesar de que se presentaron en el apartado de calibración (apartado 2.4), la correcta creación de los planisferios depende esencialmente de una correcta navegación. Una vez se tenían todas las imágenes navegadas (y calibradas), se procedió a realizar las interpolaciones de φ , λ_{CM} y I/F a una rejilla equiespaciada cuya resolución había que definir (apartado 2.4.2).

Teniendo en cuenta que el diámetro angular de Neptuno desde la Tierra es de unos 2.4 segundos de arco (Hammel, 1989) (se puede tomar el mismo tamaño desde el HST) y que la variación de longitud y/o latitud por píxel en las imágenes es del orden de un grado, la resolución de los planisferios se tomó de 0.5° .

Con la resolución definida para la creación de los planisferios, se generó un planisferio por cada una de las imágenes navegadas. En la siguiente figura se presenta uno de los planisferios obtenidos a modo de ejemplo:



Figura 29: Planisferio (F467M).

Estos planisferios no solo se han realizado interpolando el valor de I/F en una rejilla equiespaciada, si no que, también los valores de μ , μ_0 y $\Delta \varphi$ fueron interpolados, generándose, por tanto, un planisferio para cada una de dichas magnitudes. Para poder almacenar toda esta información en un mismo fichero se generó un archivo FITS con cuatro extensiones, tal y como muestra la Figura 30.

Name	Ver	Туре	Cards	Dimensions	Format
PRIMARY	1	PrimaryHDU	797	0	
PLAN	1	ImageHDU	8	(361, 321)	float64
PLAN_FULL	1	ImageHDU	8	(361, 361)	float64
MU	1	ImageHDU	8	(361, 361)	float64
MUØ	1	ImageHDU	8	(361, 361)	float64
DPHI	1	ImageHDU	8	(361, 361)	float64
	Name PRIMARY PLAN PLAN_FULL MU MU0 DPHI	NameVerPRIMARY1PLAN1PLAN_FULL1MU1MUØ1DPHI1	NameVerTypePRIMARY1PrimaryHDUPLAN1ImageHDUPLAN_FULL1ImageHDUMU1ImageHDUMU01ImageHDUDPHI1ImageHDU	NameVerTypeCardsPRIMARY1PrimaryHDU797PLAN1ImageHDU8PLAN_FULL1ImageHDU8MU1ImageHDU8MUØ1ImageHDU8DPHI1ImageHDU8	Name Ver Type Cards Dimensions PRIMARY 1 PrimaryHDU 797 () PLAN 1 ImageHDU 8 (361, 321) PLAN_FULL 1 ImageHDU 8 (361, 361) MU 1 ImageHDU 8 (361, 361) MU0 1 ImageHDU 8 (361, 361) DPHI 1 ImageHDU 8 (361, 361)

Figura 30: Formato archivo planisferio.

La extensión PLAN contiene un planisferio recortado en las latitudes cercanas al polo sur para una representación más estética. A la hora de trabajar con los planisferios, se deberá utilizar la extensión PLAN_FULL que contiene la rejilla completa.

4.2. Calibración

La calibración y la navegación de las imágenes son dos procesos totalmente independiente, pues se puede calibrar una imagen no navegada y viceversa. Aún así, para sacarle partido al elevado tiempo de ejecución que requiere la navegación, ambos procesos se realizaron consecutivamente de forma masiva para cada una de las imágenes disponibles.

Utilizando las Ecs. (11) y (12) y extrayendo respectivamente los metadatos PHOT-FLAM y D001ISCL de cada una de las imágenes, se convirtieron los datos de las imágenes de electrones/s a magnitud I/F. Sin embargo, una vez se tenían todas las imágenes calibradas, era necesario verificar que la calibración era correcta mediante los dos métodos que se detallaron en el apartado 2.4: observando cortes fotométricos y calculando el albedo geométrico.

Partiendo por los cortes fotométricos, estos permiten comprobar que la calibración es consistente en dos sentidos. En primer lugar, si la calibración era consistente para cada filtro, para lo que se realizó un corte fotométrico por el meridiano central de todas las imágenes, de forma que, para cada visita, se podían representar los cortes fotométricos de las imágenes agrupándolas por filtro. Esto permite observar si la evolución de las curvas presentes en cada filtro tienen el mismo comportamiento a gran escala.

En la Figura 31 se puede apreciar un comportamiento a gran escala prácticamente idéntico para todas las imágenes de un mismo filtro de la visita de 09/09/2018. Esta figura muestra una sola visita pero es representativa del comportamiento general que se ha encontrado en todas ellas.



Figura 31: Cortes fotométricos 09/09/2018 (Filtro F467M).



Figura 32: Cortes fotométricos 01/07/2020 (Filtro F845M).

En la Figura 32 se muestra de nuevo un corte para un filtro de todas las imágenes de la visita de 01/07/2020 con el objetivo de mostrar los detalles atmosféricos que pueden ser detectados mediante la realización de cortes fotométricos. En este caso, los detalles tenían una reflectividad mayor que el entorno. Aún así, el comportamiento a gran escala de todos los cortes, es prácticamente idéntico.

Se puede concluir, por tanto, que la calibración fotométrica es consistente para cada filtro dentro de cada visita; los cortes fotométricos realizados para imágenes con un mismo filtro para una misma visita tienen un comportamiento general muy similar.

En segundo lugar, se quiso comprobar si la calibración era consistente temporalmente. Para esto, es necesario analizar la evolución de los cortes fotométricos por el meridiano central de todas las visitas, por cada filtro. Como existen varias imágenes por cada filtro en cada visita, lo ideal sería tener un planisferio representativo de cada filtro por cada visita.

Con este objetivo, se calculó la mediana de todos los planisferios, por filtro y visita, de forma que se obtuvo un planisferio mediana para cada filtro en cada visita. Esto permite, además de poder realizar un análisis de la variación de los cortes fotométricos con el tiempo, eliminar algunos de los detalles atmosféricos que puedan haber sido detectados por los cortes, quedando el comportamiento general de cada uno de ellos, que es el factor a analizar. Esto último es posible gracias a haber realizado la mediana de los planisferios en lugar de la media, pues en esta última operación, los extremos tienen mucho más peso y los detalles atmosféricos habrían influido mucho más en el planisferio final. En el Anexo I se encuentran todos los planisferios mediana completos para la visita con fecha 19/08/2020 (pues será la que se utilice en la modelización) y en el Anexo II se encuentran todos los cortes fotométricos por el meridiano central por filtro, para todas las visitas.

Con el planisferio mediana para cada filtro y visita, se muestra en las Figuras 33 y 34 (ambas incluidas en el Anexo II) la evolución temporal de los cortes para dos de los filtros disponibles.

En ambas figuras se puede observar un comportamiento anómalo en las dos visitas de 2016 (en azul y amarillo). Ambas visitas tienen un valor de I/F sistemáticamente superior al del resto de visitas que, en cambio, tienen un valor muy similar entre ellas. En la Figura 34 los detalles atmosféricos no han podido ser eliminados a través de los planisferios mediana en algunas visitas pues no se tenían suficientes imágenes en esos casos para hacer un promediado correcto.



Figura 33: Cortes fotométricos todas las visitas (Filtro F547M).

El otro procedimiento ya descrito para detectar comportamientos anómalos en la calibración fotométrica consistía en calcular el albedo geométrico y realizar una comparación con el espectro de Karkoschka, de forma que se pudiese observar la bondad del ajuste entre ambos y, con esta, la calidad de la calibración fotométrica en su conjunto.

Aprovechando los planisferios mediana generados para los cortes fotométricos, el albedo geométrico se calculará para cada visita y para cada filtro, a partir de los mismos. Tal y como ya se introdujo en el apartado 2.4.3, se realizará una media ponderada del



Figura 34: Cortes fotométricos todas las visitas (Filtro F763M).

valor I/F de todos los píxeles, teniendo como peso cada uno de ellos el producto del ángulo de emisión μ y el ángulo de incidencia μ_0 correspondientes a cada píxel.

Una vez calculados los albedos es posible representar con un punto el valor del albedo geométrico para cada visita y cada filtro y comprobar como las distintas nubes de puntos se ajustan, o no, al espectro de Karkoschka.

Atendiendo a la Figura 35, los albedos geométricos, en general, se ajustan correctamente a lo dictado por el espectro de Karkoschka. Sin embargo, se puede observar, de nuevo, el comportamiento anómalo de las visitas de 2016, que tienen un valor sistemáticamente superior del albedo geométrico en comparación con el resto de visitas, cuyos valores son mucho más similares entre sí. En este punto, se decidió no realizar ninguna corrección suplementaria y simplemente no utilizar los datos de las visitas de 2016 para la modelización de la atmósfera del planeta.

Por otro lado, en la visita de 2015-09 (en rojo) se observa también un valor anómalo en el filtro F631N en comparación a lo observado por Karkoschka. Esto, unido a que es la única visita en la que se utilizan ciertos filtros y, por tanto, inutilizables para analizar la evolución temporal de la atmósfera en esos rangos espectrales, hace que se considere no utilizar tampoco las visitas de 2015 para la modelización de la atmósfera del planeta.



Figura 35: Albedos geométricos y Espectro de Karkoschka de Neptuno (1993).

4.2.1. Ajuste de Minnaert

Para poder comenzar a realizar modelos de transporte radiativo de la atmósfera de Neptuno, es necesario realizar un análisis previo de las imágenes obtenidas tras el proceso de calibración.

El valor de I/F, también llamado, reflectividad absoluta, tiene una dependencia con el valor de los cosenos de los ángulos de incidencia y emisión de la forma que dicta la Ley de Minnaert (Minnaert, 1941):

$$\left(\frac{I}{F}\right)(\mu,\mu_0) = \left(\frac{I}{F}\right)_0 \mu_0^k \ \mu^{k-1},\tag{33}$$

donde $(I/F)_0$ representa la reflectividad que tendría el punto desde el punto de vista nadir, es decir, si $\mu = \mu_0 = 1$ y k representa el coeficiente de oscurecimiento hacia el limbo. Para valores de k > 0.5 existe un oscurecimiento hacia el limbo mientras que para valores de k < 0.5 existe un abrillantamiento hacia el limbo. En el caso k = 1, la atmósfera se comportaría como una superficie lambertiana. Determinando esta dependencia, los resultados fotométricos obtenidos en el meridiano central pueden extenderse a otras longitudes (Mendikoa et al., 2017).

La Ec. (33) puede manipularse aplicando las propiedades de los logaritmos de manera que todas las magnitudes estén relacionadas de forma lineal:

$$ln(\mu \cdot I/F) = ln\left(\frac{I}{F}\right)_0 + k \cdot ln(\mu \cdot \mu_0), \qquad (34)$$

donde la pendiente de la recta es m = k y la ordenada en el origen es $b = ln \left(\frac{I}{F}\right)_0$.

Así, teniendo el valor de (I/F), $\mu \neq \mu_0$, se puede realizar una regresión lineal de los conjuntos de valores $(x, y) = (ln(\mu \cdot \mu_0), ln(\mu \cdot I/F))$ de forma que:

$$\left(\frac{I}{F}\right)_0 = e^b \tag{35}$$

$$k = m \tag{36}$$

La manera en la que esto último se ha implementado en este trabajo es la siguiente: tomando cada uno de los planisferios mediana, se ha realizado un corte fotométrico a lo largo de todos los paralelos y se ha realizado un ajuste lineal de los valores $(ln(\mu \cdot \mu_0), ln(\mu \cdot I/F))$ de todos los píxeles del paralelo. En la Figura 36 se puede observar un ejemplo de uno de estos ajustes.

Una vez obtenida la pendiente y la ordenada en el origen del ajuste, utilizando las Ecs. (35) y (36), se puede asignar un par $[(I/F)_0, k]$ a cada latitud, por filtro y visita.



Figura 36: Ajuste lineal latitud 5°N 06-10-2017 (Filtro FQ619N).

Los pares $[(I/F)_0, k]$, así como la desviación en ambas magnitudes y el coeficiente de determinación de los ajustes para cada latitud de cada filtro se han almacenado, de nuevo, en un archivo FITS para cada visita. En el Anexo III se encuentran representados los valores de $(I/F)_0$ y k para cada latitud por filtro y visita.

4.3. Modelización

Con la revisión de los posibles comportamientos anómalos de la calibración, las consecuentes decisiones tomadas y la obtención de los pares $[(I/F)_0, k]$ para cada latitud, se tienen los datos necesarios para poder pasar a la modelización de la atmósfera de Neptuno, de forma que se puedan estimar los parámetros atmosféricos que responden a las observaciones.

4.3.1. Modelo inicial

Tal y como se detalló en el apartado 3.2, los modelos que utiliza *Planetary Spectrum Generator* están conformados por los campos 'Objeto y Geometría', 'Atmósfera y Superficie' e 'Instrumento' que deberán ser definidos para el caso concreto que se abarca en este trabajo.

Comenzando por el campo 'Objeto y Geometría', el planeta será, lógicamente, Neptuno y sus propiedades físicas (diámetro, densidad, distancia al Sol, periodo, etcétera) se dejarán con los valores por defecto. En cuanto a la geometría, hay dos campos que son relevantes con los que se trabajará durante las simulaciones:

- Beam [FWHM]: Se refiere al campo de visión (FOV) del instrumento. Para poder seleccionar un único punto, se eligirá en todos los modelos un Beam de magnitud 1 con unidades de 'Diffraction' que vendrán dadas por el diámetro del instrumento y la longitud de onda central de la observación. Esto implica asumir que el HST está trabajando en su límite de difracción, como es consistente con dicho telescopio.
- Offsets [NS/EW]: A través de estos dos offsets se pueden seleccionar las coordenadas del punto elegido con respecto al punto sub-observador.

En cuanto a la fecha, se eligirá una de las visitas del conjunto de imágenes de Neptuno. Las simulaciones de este trabajo se realizarán únicamente a fecha de 19/08/2020.

En el campo 'Atmósfera y Superficie' se ha asumido una atmósfera en equilibrio hidrostático y se han dejado los gases que provee PSG por defecto: H_2 , He, CH_4 , CO y HCN. Sin embargo, los aerosoles si han sido modificados respecto a los que se proporcionaban por defecto.

Se han incluido en los modelos tres aerosoles: WaterIce, Ammonia y Methane que simulan los tres aerosoles (Aerosol-1, Aerosol-2 y Aerosol-3, respectivamente) que incluyen los modelos de Urano y Neptuno de Irwin et al. (2022). La distribución vertical de estos aerosoles, por tanto, también ha debido ser modificada para que los espesores ópticos se encuentren dentro de los rangos de referencia. Las propiedades de dichos aerosoles (*extinction cross section (Q_{ext}), single-scattering albedo* y el parámetro de asimetría) fueron obtenidas de Gasteiger y Wiegner (2018).

Por último, en el campo 'Instrumento', simplemente se seleccionó al Telescopio Espacial Hubble, cuyas especificaciones ya están descritas por defecto en PSG.

Una vez se confeccionó el modelo inicial de referencia de la atmósfera de Neptuno,

se pudo comenzar a utilizar los datos observacionales en sinergia con las dos técnicas descritas en los apartados 3.3 y 3.4 para realizar las inversiones.

4.3.2. Nelder-Mead

El primer abordaje para la resolución del problema inverso que se ha utilizado en este trabajo es el algoritmo de Nelder-Mead. Con este método, se generan nuevos modelos atmosféricos de forma iterativa modificando ciertos parámetros del modelo de referencia de forma que el valor $\bar{\chi}^2$ (Ec. (25)) entre el espectro observado y el generado por PSG con los nuevos modelos sea el mínimo posible con las limitaciones que han sido discutidas en el apartado 3.3.

A partir de los planisferios mediana, se extrajo el valor I/F correspondiente a cada longitud de onda (a cada filtro), así como el valor de μ y μ_0 para una latitud y longitud concreta, pudiéndose representar I/F frente a la longitud de onda como se observa en la siguiente figura.



Figura 37: Espectro observado Latitud 22°N Longitud 0°E.

El espectro observado es uno de los parámetros de entrada que necesita el algoritmo para poder realizar el *retrieval*. El resto de parámetros de entrada son precisamente los parámetros atmosféricos que se modificarán del modelo y sus valores a priori. En este trabajo se operó con cuatro: la abundancia del metano profundo y las abundancias de los tres aerosoles del modelo de referencia de Irwin et al. (2022) (Aerosol-1, Aerosol-2 y Aerosol-3).

Se utilizó el espectro observado del punto de latitud 22° N y longitud 0° E (Figura 37) y los valores a priori de la siguiente tabla para la inicialización del algoritmo.

Modelo referencia			
Parámetro	Espesor óptico (τ)		
CH_4 profundo	-		
Aerosol-1	0.65		
Aerosol-2	1.52		
Aerosol-3	0.04		

Los espesores ópticos se han calculado en todos los casos para una longitud de onda de $\lambda = 0.8 \ \mu m$.

Con el punto elegido y los parámetros de entrada listos, se ejecutó el algoritmo y se obtuvieron los siguientes valores para los espesores ópticos:

Modelo Nelder-Mead			
Parámetro	Espesor óptico (τ)		
CH_4 profundo	-		
Aerosol-1	1.04573		
Aerosol-2	0.97716		
Aerosol-3	0.01821		

Estos valores de los parámetros atmosféricos generan un nuevo espectro que, en principio, se debe ajustar de una forma más precisa al espectro observado que el generado por el modelo de referencia. En la Figura 38 se puede observar la comparación entre los tres espectros.



Figura 38: Ajuste espectro observado con modelo de referencia y modelo tras retrieval (Nelder-Mead).

Los valores de $\bar{\chi}^2$ del modelo de referencia y del modelo final se pueden observar en la propia Figura 38, habiéndose reducido este valor de 0.94 para el espectro de referencia a 0.14 para el espectro calculado por el algoritmo. Se muestra en la siguiente tabla los valores a priori y a posteriori de los parámetros involucrados a modo de comparativa.

	Modelo referencia	Modelo Nelder-Mead
Parámetro	Espesor óptico (τ)	Espesor óptico (τ)
CH ₄ profundo	-	-
Aerosol-1	0.65	1.04573
Aerosol-2	1.52	0.97716
Aerosol-3	0.04	0.01821
$\bar{\chi}^2$	0.94	0.14

El nuevo modelo obtenido consta, al contrario que en el modelo de referencia, de una nube de Aerosol-1 más espesa que la de Aerosol-2, manteniendo el espesor óptico del Aerosol-3 como el menor de todos ellos.

El algoritmo de Nelder-Mead se ha utilizado en este trabajo como primer acercamiento a las herramientas de resolución de los *retrievals* atmosféricos. Sin embargo, al haberse operado únicamente con datos en I/F, no es posible obtener más información acerca de cómo los parámetros atmosféricos involucrados afectan al *limb-darkening*. Podrían realizarse de nuevo análisis con Nelder-Mead para estudiar estos efectos pero serán las técnicas de inferencia Bayesiana las que se utilicen para obtener mayor información tanto de los efectos de oscurecimiento al limbo como de la estimación de los parámetros atmosféricos.

4.3.3. MultiNest

Los *retrievals* atmosféricos obtenidos mediante MultiNest ya no solo se centran en obtener el menor valor posible de $\bar{\chi}^2$, sino que además proporcionan información acerca de la probabilidad a posteriori de los valores de los parámetros atmosféricos, correlación entre los mismos y la evidencia bayesiana del modelo obtenido.

De nuevo, para utilizar MultiNest es necesario partir de un modelo de referencia que, tal y como se utilizó con el método de Nelder-Mead, se tomó basado en el modelo de Irwin et al. (2022). Los parámetros atmosféricos con los que se operó fueron también la abundancia del metano profundo y las abundancias de los tres aerosoles (Aerosol-1, Aerosol-2 y Aerosol-3).

A diferencia de Nelder-Mead, con MultiNest no hay que proporcionar un valor a priori de los parámetros sino una distribución de probabilidad a priori de los mismos. Se optó por utilizar una función de probabilidad uniforme cuyos límites se encuentran, para cada parámetro, en la siguiente tabla.

Parámetro	Límite inferior	Límite superior
CH ₄ profundo	0.001	10.0
Aerosol-1	0.1	100.0
Aerosol-2	0.001	10.0
Aerosol-3	0.1	10.0

Los *retrieval* que se realizaron con MultiNest en este trabajo se hicieron utilizando los datos observacionales, es decir, los espectros, de dos puntos del planeta. Concretamente, en las simulaciones que se han llevado a cabo se emplearon los puntos con latitud 22° N y longitud 0° E y 50° E.

Teniendo los parámetros de entrada del algoritmo listos, se realizó el *retrieval* y los resultados se pueden observar de tres formas diferentes: a través de las probabilidades a posteriori de los parámetros atmosféricos, a través de la comparación de los espectros de $(I/F)_0$ y k y a través de los espesores ópticos del modelo con mayor probabilidad.

Las probabilidades a posteriori de los parámetros de entrada se representó mediante un *corner plot* que permite observar no solo dichas probabilidades sino las correlaciones dos a dos entre los distintos parámetros.



Figura 39: Ejemplo de *corner plot* de los parámetros empleados en esta exploración. Los valores están en escala logarítmica. Las abundancias de los aerosoles están dadas como multiplicadores (*scalers*) de la distribución inicial.

A partir de la Figura 39 se puede deducir que las abundancias de CH_4 y del Aerosol-3 ("Methane") están relativamente acotadas con una anchura de incertidumbre mayor para el último de ellos. Para el caso de las abundancias de Aerosol-1 ("WaterIce") y Aerosol-2 ("Ammonia"), solo se tiene certeza de una cota inferior y superior, respectivamente, para sus *scalers*.

Pasando a los espectros, se comparan en la Figura 40 el espectro observado, el de

referencia y el del modelo obtenido con MultiNest.

A pesar de que el modelo de referencia tenga visualmente un mejor ajuste al espectro observado de $(I/F)_0$, el modelo obtenido con MultiNest se ajusta mucho mejor al espectro observado de k, prediciendo adecuadamente en qué filtros se observa oscurecimiento y en cuáles abrillantamiento hacia el limbo. En esta figura no solo aparece el espectro del mejor modelo generado con MultiNest, sino que aparecen los espectros de los 100 mejores modelos. Sin embargo, la diferencia entre ellos es inapreciable.



Figura 40: Espectros $(I/F)_0$ y k de los modelos involucrados.

Los valores de $\bar{\chi}^2$ también aparecen en la figura pero se mostrarán en una última tabla junto a los valores de los espesores ópticos y de la evidencia bayesiana del modelo.

	Modelo referencia	Modelo MultiNest	
Parámetro	Espesor óptico (τ)	Espesor óptico (τ)	
CH ₄ profundo	-	-	
Aerosol-1	0.65	6.53145	
Aerosol-2	1.52	0.15206	
Aerosol-3	0.04	0.26873	
$\overline{v^2}$		$(\mathrm{I/F})_0$ k	
	-	16.671 12.653	
$\log \mathcal{Z}$	-	-75.309	

Los resultados obtenidos sugieren que, con los parámetros de entrada utilizados (y fijando el resto de parámetros atmosféricos), el *retrieval* fuerza a la nube intermedia (Aerosol-2) a ser menos espesa mientras que la nube inferior (Aerosol-1) resulta mucho más gruesa.

Para mantener la compatibilidad con los datos y modelos dados por Irwin et al. (2022), sería necesario introducir nuevos parámetros como pueden ser el tamaño de las partículas de los aerosoles o su índice de refracción imaginario, el cual está relacionado con la capacidad de absorción de las partículas. Una exploración más completa del espacio de parámetros a posteriori podría incluso llegar a demostrar que las ideas iniciales sobre las distribución vertical de los aerosoles estaban sesgadas por las hipótesis iniciales de Irwin et al. (2022). Este sesgo inicial podría corregirse gracias a la utilización de técnicas de inferencia Bayesiana, pues evaluando la evidencia bayesiana se podría proponer la plausibilidad de diferentes modelos.

Los resultados obtenidos son claramente mejorables pero la importancia de haber llegado a los mismos recae en que los modelos y los códigos ya están listos para seguir operando en la estimación de los parámetros atmosféricos. Además, al utilizarse técnicas de inferencia bayesiana, es posible la comparación entre diferentes modelos, donde distintos conjuntos de parámetros entren en juego, gracias al cálculo de la evidencia bayesiana que proporciona MultiNest.

5. Conclusiones

Este trabajo aúna diferentes conceptos y técnicas relacionadas con el estudio de las atmósferas planetarias, desde la navegación y la calibración de las imágenes, hasta la creación de modelos atmosféricos y la estimación de sus parámetros.

A pesar de que estos son aspectos ampliamente conocidos y utilizados en las investigaciones del campo, podría considerarse que este Trabajo de Fin de Máster debe su completitud a la implementación de Elkano y a la descripción y utilización de técnicas de inferencia Bayesiana.

Implementación de Elkano

Tras el seminario impartido por Jorge Hernández Bernal al Grupo de Ciencias Planetarias de la UPV/EHU, salió a relucir el gran potencial de la herramienta Elkano para la navegación de imágenes planetarias.

Tal y como ya se ha mencionado en este trabajo, existen otras herramientas que permiten la navegación de las imágenes de forma semi-automática, es decir, requiriendo obligatoriamente la interacción con el usuario. Sin embargo, con la gran cantidad de imágenes que eran necesarias navegar para la realización de este trabajo y la alta modularidad de Elkano, lo más inmediato era diseñar métodos de navegación automática utilizando esta librería.

Una vez se realizó el estudio en detalle del funcionamiento interno de Elkano, se pudieron diseñar funciones y códigos completos que consiguiesen no solo navegar las imágenes sino almacenar los resultados de dicha navegación en un formato sencillo de manipular y utilizar en posteriores análisis.

Técnicas de inferencia Bayesiana

Las técnicas de transporte radiativo son una potente herramienta en el estudio de las atmósferas planetarias que permiten generar los espectros (tanto reflejados como emitidos) de estos cuerpos a través de la definición parámetros como estructuras verticales de partículas, tamaño de las mismas o composición atmosférica, entre otros. Con los *retrieval* atmosféricos es posible inferir dichas propiedades atmosféricas a través de las observaciones, buscando siempre el mejor ajuste entre modelos y datos experimentales.

En este trabajo, se han descrito brevemente los fundamentos de las técnicas de inferencia Bayesiana y se han presentado las ventajas que estas proporcionan en el estudio de las atmósferas planetarias: estimación de probabilidades a posteriori de parámetros atmosféricos y selección de modelos en base a la evidencia bayesiana.

Los resultados logrados en este trabajo en cuanto a la estimación de parámetros y la selección de modelos son limitados debido a que estos no conforman el groso de los objetivos. Sin embargo, estos dejan presente que tanto los datos extraídos de las imágenes de Neptuno como los códigos diseñados están preparados para seguir profundizando en la obtención de modelos más realistas.

5.1. Cumplimiento de objetivos

- 1. Navegación automática de las imágenes: Se han desarrollado códigos que permiten la navegación automática de forma masiva de las imágenes disponibles de Neptuno tomadas por el HST/WFC3 (apartado 4.1) pudiéndose aplicar, con ligeras modificaciones, a imágenes de otros planetas tomadas por el mismo instrumento. De un total de 1812 imágenes, 1590 han sido navegadas.
- 2. Calibración de las imágenes: Se han adaptado códigos ya existentes para la calibración de las imágenes de otros planetas a Neptuno de forma exitosa además de realizarse un análisis de la consistencia temporal y espectral de la calibración (apartado 4.2).
- 3. Creación de planisferios: Utilizando una interpolación de datos no equiespaciados a una rejilla equiespaciada se han generado planisferios de las imágenes navegadas y calibradas $(I/F, \mu, \mu_0 \text{ y } \Delta \varphi)$ con una resolución de 0.5° (Anexo I).
- 4. Obtención de $(I/F)_0$ y k: Con los datos de la navegación en formato matricial fue inmediato implementar un ajuste de Minnaert para cada latitud de los planisferios obteniendo un par $[(I/F)_0, k]$ para cada una de ellas (apartado 4.2.1).
- 5. Almacenaje en archivos FITS: Los datos calibrados y navegados fueron almacenados en el mismo fichero (Figura 27), los planisferios se almacenaron en un fichero con una extensión dedicada para los datos calibrados (I/F), μ , μ_0 y $\Delta \varphi$ (Figura 30). Por otro lado, los pares $[(I/F)_0, k]$, así como los resultados de los ajustes lineales también han sido almacenados en un fichero para su posterior utilización.
- 6. Modelos de transporte radiativo: Se han creado modelos de transporte radiativo de la atmósfera de Neptuno para una de las visitas disponibles y se ha utilizado la API en Python para modificar abundancias, perfiles verticales, ángulos de observación y, en general, los parámetros necesarios para reproducir la estructura de referencia marcada en Irwin et al. (2022).
- 7. Inversiones: Se han adaptado códigos que utilizan Nelder-Mead y MultiNest para poder trabajar con los datos obtenidos en los objetivos **3** y **4**, utilizando los ficheros generados con el objetivo **5**. Además, se han mostrado los primeros resultados obtenidos con dichos códigos para mostrar el potencial de los mismos en la estimación de parámetros atmosféricos y selección de modelos (apartado 4.3.3).

5.2. Trabajo futuro

A pesar de haber alcanzado con éxito los objetivos propuestos al inicio de este trabajo, este supone solo la preparación de los datos para el estudio de la atmósfera de Neptuno a partir de las imágenes tomadas por HST/WFC3.

En primer lugar, los comportamientos anómalos de la calibración que se han detectado en algunas de las visitas no han sido analizados con el objetivo de darles justificación, sino, por el contrario, para evitar utilizar dichos datos en los análisis posteriores. Una de las posibles tareas futuras sería estudiar el origen de dichos comportamientos.

En segundo lugar, el análisis temporal de los datos no ha sido realizado en este trabajo;

los modelos de transporte radiativo que se han generado solo responden a una de las visitas. Extender el trabajo realizado al resto de las visitas es una tarea obligatoria para este propósito.

En tercer lugar, el análisis espacial de los datos tampoco ha sido realizado en este trabajo; los *retrievals* obtenidos mediante Nelder-Mead o MultiNest solo responden a dos longitudes para una latitud concreta. Con un modelo definido para una visita, es posible extender el trabajo para otros puntos del planeta.

En cuarto lugar, los resultados obtenidos en la estimación de los parámetros atmosféricos tras el *retrieval* con MultiNest no son los más acotados o realistas posibles. En este trabajo se ha pretendido mostrar que los datos están ya listos para ser analizados en un futuro y que se tiene la comprensión del funcionamiento de este tipo de técnicas. Extensiones venideras en este ámbito podrían estar en torno a la modificación de la función de probabilidad a priori o la inclusión de nuevos parámetros de entrada.

Bibliografía

Acton Jr, C. H. (1996). Ancillary data services of NASA's navigation and ancillary information facility. Planetary and Space Science, 44(1), 65-70.

Acton, C., Bachman, N., Semenov, B., & Wright, E. (2018). A look towards the future in the handling of space science mission geometry. Planetary and Space Science, 150, 9-12.

Bevington, P. R., Robinson, D. K., Blair, J. M., Mallinckrodt, A. J., & McKay, S. (1993). Data reduction and error analysis for the physical sciences. Computers in Physics, 7(4), 415-416.

Chandrasekhar, S. (2013). Radiative transfer. Courier Corporation.

Cockell, C. S. (1999). Life on venus. Planetary and Space Science, 47(12), 1487-1501.

Colina, L., Bohlin, R.C., Castelli, F., 1996. The 0.12–2.5 micron absolute flux distribution of the Sun for comparison with solar analog stars. Astron. J. 112, 307–315.

Crew of STS-125 (2009) The Hubble Space Telescope as seen from the departing Space Shuttle Atlantis, flying STS-125, HST Servicing Mission 4 Imagen Hubble, https://catalog.archives.gov/OpaAPI/media/23486741/content/stillpix/255-sts/STS125/STS125_ESC_JPG/255-STS-s125e011848.jpg [consultado en junio 2023]

de Pater, I., Fletcher, L. N., Pérez-Hoyos, S., Hammel, H. B., Orton, G. S., Wong, M. H., ... & Boslough, M. (2010). A multi-wavelength study of the 2009 impact on Jupiter: Comparison of high resolution images from Gemini, Keck and HST. Icarus, 210(2), 722-741.

Dressel, L. & Marinelli, M. (2023). "Wide Field Camera 3 Instrument Handbook, Version 15.0" (Baltimore: STScI)

Feng, Y., & Hamerly, G. (2006). PG-means: learning the number of clusters in data. Advances in neural information processing systems, 19.

Feroz, F., & Hobson, M. P. (2008). Multimodal nested sampling: an efficient and robust alternative to Markov Chain Monte Carlo methods for astronomical data analyses. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 384(2), 449-463.

Feroz, F., Hobson, M. P., & Bridges, M. (2009). MultiNest: an efficient and robust Bayesian inference tool for cosmology and particle physics. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 398(4), 1601-1614.

Fischer, R., Preuss, R., & Toussaint, U. V. (2004). Bayesian inference and maximum entropy methods in science and engineering. In Bayesian Inference and Maximum Entropy Methods in Science and Engineering: 24th International Workshop on Bayesian Inference and Maximum Entropy Methods in Science and Engineering (Vol. 735).

Fletcher, L. N., Helled, R., Roussos, E., Jones, G., Charnoz, S., André, N., ... & Turrini, D. (2020). Ice Giant Systems: The scientific potential of orbital missions to Uranus and Neptune. Planetary and Space Science, 191, 105030.

Gasteiger, J., & Wiegner, M. (2018). MOPSMAP v1. 0: a versatile tool for the modeling of aerosol optical properties. Geoscientific Model Development, 11(7), 2739-2762.

Hammel, H. B. (1989). Discrete cloud structure on Neptune. Icarus, 80(1), 14-22.

Hart, M. H. (1978). The evolution of the atmosphere of the Earth. Icarus, 33(1), 23-39.

Hernández-Bernal, J. (2022). Meteorological phenomena on Mars studied with Mars Express VMC images.

Hernández-Bernal, J., Sánchez-Lavega, A., del Río-Gaztelurrutia, T., Ravanis, E., Cardesín-Moinelo, A., Connour, K., ... & Hauber, E. (2021). An extremely elongated cloud over Arsia Mons volcano on Mars: I. Life cycle. Journal of Geophysical Research: Planets, 126(3).

Hernández-Bernal, J., Spiga, A., Sánchez-Lavega, A., del Río-Gaztelurrutia, T., Forget, F., & Millour, E. (2022). An Extremely Elongated Cloud Over Arsia Mons Volcano on Mars: 2. Mesoscale Modeling. Journal of Geophysical Research: Planets, 127(10).

Irwin, P. G., Teanby, N. A., Fletcher, L. N., Toledo, D., Orton, G. S., Wong, M. H., ... & Dobinson, J. (2022). Hazy blue worlds: A holistic aerosol model for Uranus and Neptune, including dark spots. Journal of Geophysical Research: Planets, 127(6).

Jara, S. A. N. (2021). Un enfoque bayesiano para la inversión de datos geodésicos y selección de modelos aplicado al deslizamiento cosísmico asociado al terremoto del Maule MW 8, 8 DE 2010 (Doctoral dissertation, Universidad de Concepción).

Karkoschka, E. (1994). Spectrophotometry of the jovian planets and Titan at 300-to 1000-nm wavelength: The methane spectrum. Icarus, 111(1), 174-192.

Liou, K. N. (2002). An introduction to atmospheric radiation (Vol. 84). Elsevier.

Mendikoa, I., Sánchez-Lavega, A., Pérez-Hoyos, S., Hueso, R., Rojas, J. F., & López-Santiago, J. (2017). Temporal and spatial variations of the absolute reflectivity of Jupiter and Saturn from 0.38 to 1.7 μ m with PlanetCam-UPV/EHU. Astronomy & Astrophysics, 607, A72.

Minnaert, M. (1941). The reciprocity principle in lunar photometry. Astrophysical Journal, vol. 93, p. 403-410 (1941)., 93, 403-410.

Mukherjee, P., Parkinson, D., & Liddle, A. R. (2006). A nested sampling algorithm for cosmological model selection. The Astrophysical Journal, 638(2), L51.

Munguira, A. (2020) Implementación de API en python para el Planetary Spectrum

Generator y aplicación a las atmósferas planetarias, Trabajo Fin de Máster, Máster en Ciencia y Tecnología Espacial UPV/EHU.

NASA (2023), "Servicing missions: Enabling science through new technologies" en Hubblesite, https://hubblesite.org/mission-and-telescope/servicing-missions [consultado en junio 2023].

Neary, L., & Daerden, F. (2018). The GEM-Mars general circulation model for Mars: Description and evaluation. Icarus, 300, 458-476.

Nelder, J. A. and Mead, R. (1965). A simplex method for function minimiza- tion. The computer journal, 7(4):308–313.

Parmentier, V., & Guillot, T. (2014). A non-grey analytical model for irradiated atmospheres-I. Derivation. Astronomy & Astrophysics, 562, A133.

Pelleg, D., & Moore (2006), A. X-means: Extending K-means with E cient Estimation of the Number of Clusters. In Proceedings of the 17th International Conference on Machine Learning (p. 727).

Pelleg, D., & Moore, A. (2001). Mixtures of rectangles: Interpretable soft clustering. In ICML (Vol. 2001, pp. 401-408).

Pfalzner, S., Davies, M. B., Gounelle, M., Johansen, A., Münker, C., Lacerda, P., ... & Veras, D. (2015). The formation of the solar system. Physica Scripta, 90(6), 068001.

Price-Whelan, A. M., Lim, P. L., Earl, N., Starkman, N., Bradley, L., Shupe, D. L., ... & Astropy Collaboration. (2022). The Astropy Project: sustaining and growing a community-oriented open-source project and the latest major release (v5. 0) of the core package. The Astrophysical Journal, 935(2), 167.

Roy-Pérez, Joan (2021), Espectroscopía de transmisión en planetas extrasolares, Trabajo Fin de Máster, Máster en Ciencia y Tecnología Espacial UPV/EHU.

Sánchez-Lavega, A. (2011). An introduction to planetary atmospheres. Taylor & Francis.

Shayler, D. J., & Harland, D. M. (2016). The Hubble Space Telescope: From Concept to Success. Springer New York.

Simon, A. A., Wong, M. H., & Orton, G. S. (2015). First results from the Hubble OPAL program: Jupiter in 2015. The Astrophysical Journal, 812(1), 55.

Skilling, J. (2004). Nested sampling. In Aip conference proceedings (Vol. 735, No. 1, pp. 395-405). American Institute of Physics.

Turner-Valle, J. A., Sullivan, J., Mentzell, J. E., & Woodruff, R. A. (2004). Wide Field Camera 3 instrument optical design for the Hubble Space Telescope. In Optical, Infrared, and Millimeter Space Telescopes (Vol. 5487, pp. 317-329). SPIE.

Villanueva, G. L., Liuzzi, G., Faggi, S., Protopapa, S., Kofman, V., Fauchez, T., ... & Mandell, A. M. (2022). Fundamentals of the planetary spectrum generator. Fundamentals of the Planetary Spectrum Generator. 2022 edition of the handbook by GL Villanueva et al. ISBN 978-0-578-36143-7.

Villanueva, G. L., Smith, M. D., Protopapa, S., Faggi, S., & Mandell, A. M. (2018). Planetary Spectrum Generator: An accurate online radiative transfer suite for at-mospheres, comets, small bodies and exoplanets. Journal of Quantitative Spectros- copy and Radiative Transfer, 217, 86-104.





Figura A.1.1: Planisferio mediana (Filtro F467M).



Figura A.1.2: Planisferio mediana (Filtro F547M).



Figura A.1.3: Planisferio mediana (Filtro F657N).



Figura A.1.4: Planisferio mediana (Filtro F763M).



Figura A.1.5: Planisferio mediana (Filtro F845M).



Figura A.1.6: Planisferio mediana (Filtro FQ619N).



Figura A.1.7: Planisferio mediana (Filtro FQ727N).

Anexo II: Cortes fotométricos por el meridiano central



Figura A.2.1: Cortes fotométricos (Filtro F336W).



Figura A.2.2: Cortes fotométricos (Filtro F390M).


Figura A.2.3: Cortes fotométricos (Filtro F410M).



Figura A.2.4: Cortes fotométricos (Filtro F467M).



Figura A.2.5: Cortes fotométricos (Filtro F547M).



Figura A.2.6: Cortes fotométricos (Filtro F631N).



Figura A.2.7: Cortes fotométricos (Filtro F657N).



Figura A.2.8: Cortes fotométricos (Filtro F763M).



Figura A.2.9: Cortes fotométricos (Filtro F845M).



Figura A.2.10: Cortes fotométricos (Filtro FQ619N).



Figura A.2.11: Cortes fotométricos (Filtro FQ727N).



Figura A.2.12: Cortes fotométricos (Filtro FQ750N).



Figura A.2.13: Cortes fotométricos (Filtro FQ889N).



Figura A.2.14: Cortes fotométricos (Filtro FQ937N).

Anexo III: Cortes de $(I/F)_0$ y k

Aclaración: la leyenda se refiere tanto a las curvas de $(I/F)_0$ como a las de k pero se han representado separadas para una mejor visualización de las mismas.



F336W

Figura A.3.1: Cortes $(I/F)_0$ y k (Filtro F336W).



F390M

Figura A.3.2: Cortes $(I/F)_0$ y k (Filtro F390M).



Figura A.3.3: Cortes $(I/F)_0$ yk (Filtro F410M).



F467M

Figura A.3.4: Cortes $(I/F)_0$ y k (Filtro F467M).



F547M

Figura A.3.5: Cortes $(I/F)_0$ y k (Filtro F547M).



F631N

Figura A.3.6: Cortes $(I/F)_0$ yk (Filtro F631N).



F657N

Figura A.3.7: Cortes $(I/F)_0$ y k (Filtro F657N).



F763M

Figura A.3.8: Cortes $(I/F)_0$ y k (Filtro F763M).



F845M

Figura A.3.9: Cortes $(I/F)_0$ y k (Filtro F845M).



Figura A.3.10: Cortes $(I/F)_0$ yk (Filtro F953N).



FQ619N

Figura A.3.11: Cortes $(I/F)_0$ y
 k (Filtro FQ619N).



FQ727N

Figura A.3.12: Cortes $(I/F)_0$ y
 k (Filtro FQ727N).



Figura A.3.13: Cortes $(I/F)_0$ yk (Filtro FQ750N).



Figura A.3.14: Cortes $(I/F)_0$ y k (Filtro FQ889N).



Figura A.3.15: Cortes $(I/F)_0$ yk (Filtro FQ937N).