



**Búsqueda de metano en la atmósfera de Marte  
mediante promedios de espectros de ocultación  
solar tomados por NOMAD/TGO**

Miguel Escudero Jiménez

Tutorizado por

Miguel Ángel López Valverde

Javier Peralta Calvillo

## **Agradecimientos**

A mis tutores, por toda su paciencia e indispensable guía.

A todo el consorcio de NOMAD y al equipo del IAA/CSIC,

ya que este trabajo no hubiera sido posible sin su esfuerzo.

A mi familia, por su constante apoyo y confianza que depositan en mí.

A Teresa, por transmitirme una visión única e increíble de la vida.

# Resumen

A principios de 2016 se lanzó la misión *ExoMars Trace Gas Orbiter* (TGO) de la ESA y Roscosmos. Uno de sus principales objetivos es detectar y medir, en su caso, la variabilidad de diversos gases traza. Para ello se utilizan dos instrumentos de sondeo remoto a bordo de TGO. Uno de ellos es el *Nadir and Occultation for Mars Discovery* (NOMAD), cuyo canal SO mide espectros de transmisión atmosférica en una geometría de ocultación solar. Algunos de estos gases minoritarios, como las especies de azufre, cloro, hidrocarburos o nitrógeno, son de gran interés, ya que pueden revelar procesos en la atmósfera o la superficie desconocidos hasta la fecha. Algunos son también importantes para comprender la evolución astrobiológica y geofísica de Marte. Sin embargo, debido a su escasa abundancia, sus firmas espectrales pueden estar por debajo del límite de detección. Para mejorar la capacidad de detección de NOMAD, se ha desarrollado una estrategia basada en un promediado cuidadoso de los espectros de transmitancia. El código desarrollado para tal fin, escrito en *Python*, se ha incorporado al código del *Pre-Processing*, desarrollado en el IAA para el análisis rutinario de los datos calibrados de nivel 1 de NOMAD. Un simple promedio directo de estas transmitancias no es apropiado debido a dos incertidumbres importantes: (1) errores sistemáticos aún presentes en los datos calibrados, y (2) la opacidad de los aerosoles marcianos, altamente variable y en principio desconocida. En este trabajo se ha seguido una estrategia en dos pasos; en primer lugar se calcula el continuo de absorción debido a los aerosoles, y en un segundo lugar se promedian un conjunto de espectros tras normalizar sus continuos. En este trabajo se presenta la primera aplicación de este método a una pequeña muestra de *scans* del un orden de difracción que contiene líneas espectrales de HCl, H<sub>2</sub>O y CH<sub>4</sub>. En cuanto al H<sub>2</sub>O y HCl, se ha conseguido aumentar la SNR en un factor en torno a 4, lo que permite revelar claramente líneas débiles de estos compuestos. En cuanto al CH<sub>4</sub>, no se han detectado líneas de absorción de este gas, en consonancia con trabajos anteriores de otros equipos de NOMAD y ACS. Además, se han conseguido abundancias máximas de metano en torno a 0.004 ppbv, con un criterio de 2-Sigma, lo que significa un factor 10 menor que el límite máximo anterior obtenido por Knutsen et al., 2022, con datos de NOMAD, y muy cercano a los límites de detección de ACS (en torno a 1 pptv).

# Índice de contenidos

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
1.1	La atmósfera marciana . . . . .	1
1.2	El metano en Marte. Antecedentes e importancia . . . . .	2
1.3	La misión <i>ExoMars</i> -TGO . . . . .	4
1.4	Objetivos . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Metodología y desarrollo</b>	<b>6</b>
2.1	Metodología . . . . .	6
2.1.1	Espectroscopía por ocultación solar: TGO/NOMAD . . . . .	6
2.1.1.1	Espectroscopía por ocultación solar . . . . .	6
2.1.1.2	El instrumento NOMAD . . . . .	8
2.1.1.2.1	El canal SO y el filtro AOTF . . . . .	8
2.1.2	Promediado de espectros sintéticos . . . . .	10
2.1.2.1	Generación de espectros ruidosos a partir de un espectro simulado . . . . .	11
2.1.2.2	Alineamiento y promedio de espectros . . . . .	13
2.1.3	Promediado de espectros de TGO/NOMAD . . . . .	15
2.1.3.0.1	Corrección del <i>bending</i> residual. La transformada <i>wavelet</i> . . . . .	17
2.1.3.0.2	Mejora de la determinación del continuo . . . . .	19
2.1.3.1	Estimación del límite superior de detección de metano . . . . .	22
2.1.4	Selección de datos de NOMAD . . . . .	24
2.2	Resultados . . . . .	27
2.2.1	Promedios de los <i>scans</i> seleccionados . . . . .	27
2.2.1.1	<i>Scan</i> 1: 20200828_205430 (Hemisferio sur. Solsticio de verano)	29
2.2.1.2	<i>Scan</i> 5: 20180610_085321 (Antes del inicio de la GDS) . . . . .	30
2.2.1.3	<i>Scan</i> 6: 20200813_211146 (Durante la fase de decaimiento de la GDS) . . . . .	31

2.2.1.4	<i>Scan</i> 8: 20191208_182741 (Hemisferio norte. Mediados del verano) . . . . .	32
2.2.1.5	<i>Scan</i> 9: 20190716_001551 (Hemisferio sur, temporada de afelio)	34
2.2.2	Abundancia máxima de metano . . . . .	35
2.3	Discusión de los resultados . . . . .	36
2.3.1	Relación entre la opacidad atmosférica y la desviación estándar del promedio . . . . .	36
2.3.2	Sobre el promedio del <i>scan</i> 8 entre 16 y 24 km . . . . .	37
2.3.3	Corrección del <i>bending</i> residual . . . . .	39
2.3.4	Abundancia máxima de metano . . . . .	40
<b>3</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>42</b>
3.1	Resumen de los resultados obtenidos . . . . .	42
3.2	Aplicaciones y difusión . . . . .	44
	<b>Bibliografía</b>	<b>47</b>
	<b>Anexo: subrutinas de <i>Python</i></b>	<b>55</b>

# 1 Introducción

## 1.1. La atmósfera marciana

Marte tiene una atmósfera muy tenue que ejerce una presión media en su superficie de aproximadamente 6,36 mbar[1], lo que equivale a menos de una centésima parte de la presión atmosférica terrestre. Dependiendo de la estación, la presión atmosférica en Marte varía desde los 4.0 hasta los 8.7 mbar[1]. La excentricidad de su órbita es algo mayor que la de nuestro planeta y se encuentra a una distancia media del Sol de 1.5 UA. En consecuencia, en el transcurso de una órbita completa, el Planeta Rojo recibe la mitad del promedio de radiación solar que llega a la Tierra[2]. Debido a esto, así como a la ausencia de océanos, la temperatura media global de su superficie alcanza un valor de  $-55^{\circ}\text{C}$ [3], y experimenta grandes cambios térmicos estacionales y pronunciadas variaciones de temperatura durante su ciclo diurno que pueden superar los  $70^{\circ}\text{C}$ [2].

En cuanto a su composición, el dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) constituye el componente principal, ocupando el 95.10 % de la atmósfera, seguido del nitrógeno molecular ( $\text{N}_2$ , 2.59 %), el argón (Ar, 1.94 %). El porcentaje restante está repartido en cantidades menores de agua ( $\text{H}_2\text{O}$ , 0.02 %), monóxido de carbono ( $\text{CO}$ , 0.06 %) y oxígeno molecular ( $\text{O}_2$ , 0.16 %)[1], así como en una serie de gases traza entre los cuales se halla el metano ( $\text{CH}_4$ ), o así lo han reclamado algunos estudios presentados en la siguiente sección. Esta molécula, protagonista de este trabajo, suscita un alto interés científico y plantea un gran desafío técnico por los motivos que se presentan en el apartado 1.2.

El vapor de agua presente en la atmósfera marciana tiene una presión parcial típica de  $10^{-3}$  mbar, lo cual equivale a unos  $10^{-3}$  g de  $\text{H}_2\text{O}$  por  $\text{cm}^2$ . La cantidad de agua en la atmósfera que esto representa supone una diezmilésima parte de la que existe en la Tierra. Este contenido de agua varía según el suministro o eliminación estacional de los casquetes polares marcianos,

el intercambio con el agua adsorbida<sup>1</sup> por el regolito próximo a la superficie y el transporte global debido a los vientos[4].

La misión MAVEN (*Mars Atmosphere and Volatile Evolution*) reveló que Marte ha estado perdiendo gas al espacio desde su formación, lo que ha provocado cambios significativos en su clima[5]. Las observaciones realizadas por esta sonda mostraron que cada segundo se escapan al espacio exterior alrededor de 100 gramos de materia atmosférica, debido esencialmente a la influencia del viento solar, al no haber un campo magnético global para contrarrestarlo. Varios estudios han llegado a la conclusión de que en un determinado período, Marte albergó una atmósfera primitiva notablemente densa, templada y húmeda, lo que propició la existencia de agua líquida en su superficie. Sin embargo, el progresivo desvanecimiento atmosférico, unido al hecho de que no existen suficientes depósitos de carbonato en la superficie marciana como para retener los gases de efecto invernadero, se han propuesto como las causas dominantes del cambio climático de Marte, provocando así sus condiciones actuales de baja temperatura y aridez[6].

## 1.2. El metano en Marte. Antecedentes e importancia

Las primeras detecciones de metano en Marte se publicaron en 2004, a partir del análisis de las observaciones realizadas con el instrumento FTS (*Fourier Transform Spectrometer*) del telescopio Canadá-Francia-Hawaii (1999)[7] y el PFS (*Planetary Fourier Spectrometer*), a bordo del orbitador *Mars Express* de la agencia espacial europea (ESA - *European Space Agency*) (2003) [8]. Las concentraciones de metano que se reportaron fueron en torno a 10 ppbv<sup>2</sup> y se infirió que su distribución en la atmósfera marciana podría ser heterogénea y fluctuante en función de la estacionalidad y longitud del día.

En 2003 se detectó, mediante otra serie de observaciones terrestres por espectrografía echele, la presencia de una columna de metano que llegó a alcanzar un valor pico de  $45 \pm 10$  ppbv[9]. Las lecturas de metano antes y después de este evento fueron muy bajas ( $< 7-8$  ppbv)[10]. En

---

<sup>1</sup>La adsorción implica la adherencia de moléculas o partículas en la superficie de un material sólido o líquido.

<sup>2</sup>Partes por mil millones en volumen

2011, a partir de las mediciones en espectroscopía infrarroja de alta resolución por parte de varios observatorios terrestres situados a gran altura (VLT - *Very Large Telescope*, Keck-2 - *Keck Observatory Telescope 2*, NASA-IRTF - *NASA Infrared Telescope Facility*), se estimaron límites superiores para el metano en Marte ( $<7$  ppbv)[11]. Un año después, con la incorporación del rover *Curiosity* y su espectrómetro de masas TLS (Tunable Laser Spectrometer) del instrumento SAM (*Sample Analysis at Mars*), dentro de la misión MSL (*Mars Science Laboratory*) de la NASA[12], se dio comienzo a la búsqueda *in situ* de componentes atmosféricos en la superficie marciana, concretamente en la región del cráter Gale. Las primeras medidas de *Curiosity* identificaron concentraciones de metano inferiores a 2-3 ppbv, pero con el transcurso de la misión se llegaron a detectar varios picos de concentración, con un promedio de 7.2 ppbv[13]. Varios años después del comienzo de esta misión, en 2018, medidas más sensibles aportaron evidencias más sólidas de una variación estacional en el nivel de fondo de metano atmosférico, el cual osciló entre 0.24 y 0.65 ppbv[14]. En 2019, *Curiosity* detectó el mayor pico de concentración de metano en tales condiciones (21 ppbv).

En abril de 2018 también comenzaron las observaciones del otro protagonista de este trabajo, el orbitador TGO (*Trace Gas Orbiter*) de la misión *ExoMars*[15], cuyos detalles serán abordados en el siguiente apartado. Un año después se reportaron sus primeros resultados y, a pesar de la mayor sensibilidad instrumental en comparación con las misiones anteriores, éstos fueron negativos con respecto a la detección de metano. Este hecho implicó que, de haber trazas mínimas de metano en las zonas estudiadas, su concentración debía ser inferior al límite de sensibilidad del instrumento. Dicho límite es un orden de magnitud mayor que el nivel de fondo medido por *Curiosity* ( $\lesssim 0.05$  ppbv)[16].

La presencia de metano en la atmósfera del Planeta Rojo ha despertado gran interés en la comunidad científica ya que, en la Tierra, la mayor parte del metano atmosférico es de origen biológico (por ejemplo, como producto del metabolismo microbiano)[17][18]. Por ello, la detección de metano en la atmósfera marciana y su caracterización podría arrojar luz sobre la posible existencia de vida microbiana activa o extinta, así como de materia orgánica en el planeta. No obstante, este metano también podría tener origen abiótico, ya sea a través de procesos magmáticos (desgasificación) o reacciones químicas a baja temperatura (hidrogena-



ción de  $\text{CO}_2$ )[19][20]. El  $\text{CH}_4$  es químicamente inestable en la atmósfera oxidante de Marte, principalmente a causa de la radiación ultravioleta proveniente del Sol (fotólisis) y las reacciones químicas con OH y OD<sup>3</sup>. Según el conocimiento actual sobre la fotoquímica marciana, el tiempo de vida del metano debería oscilar en el rango de los 250-300 años. Por lo tanto, la presencia episódica de metano en la atmósfera, tal y como ya la han corroborado diferentes misiones, sugiere la existencia de una fuente que lo renueva continuamente, desconocida por el momento. Para tratar de encontrar una teoría que sea consistente con las detecciones de metano hasta la fecha y los resultados negativos de TGO, un primer acercamiento debería considerar la presencia de posibles mecanismos de captación o destrucción de metano, y que además éstos sean compatibles con la fotoquímica marciana[21].

### 1.3. La misión *ExoMars-TGO*

Lanzada en 2016, la misión *ExoMars-TGO* marcó el comienzo de una serie de misiones conjuntas entre la ESA y la agencia espacial rusa *Roscosmos*. Un objetivo clave de esta misión es el estudio detallado del metano y otros gases atmosféricos presentes en Marte en concentraciones bajas, inferiores al 1 % de la atmósfera marciana. También se presta especial atención a los hidrocarburos y a las especies de azufre, ya que podrían servir como indicadores de procesos biológicos o geológicos activos, tanto en el pasado como en el presente[22].

Para alcanzar este objetivo, TGO cuenta con dos módulos especializados en la detección y caracterización de gases traza: ACS (*Atmospheric Chemistry Suite*) y NOMAD (*Nadir and Occultation for Mars Discovery*). El canal SO, uno de los espectrómetros de NOMAD, es especialmente relevante en este estudio, ya que permite realizar análisis de alta resolución espectral para identificar líneas de absorción de dichos gases. Una presentación más detallada del instrumento y su canal SO se incluye en el apartado 2.1.1. Además, TGO lleva a cabo un seguimiento de los cambios estacionales en la composición y temperatura de la atmósfera marciana, con el fin de desarrollar y mejorar modelos atmosféricos detallados[22].

---

<sup>3</sup>Radical hidroxilo pesado o deuterohidroxilo

## 1.4. Objetivos

Debido a su baja abundancia, las firmas espectrales de los gases traza pueden estar por debajo del límite de detección del instrumento NOMAD, o encontrarse ocultas en el ruido de la señal. Este hecho es el que ha motivado el objetivo principal de este trabajo: la mejora del análisis de los datos calibrados *preprocesados* de NOMAD. Para lograrlo, se ha recurrido a la implementación de un algoritmo informático escrito en el lenguaje *Python*. La tarea fundamental de este algoritmo consiste en realizar un promedio cuidadoso de espectros de transmisión. Este tratamiento pretende aumentar el límite de detección de NOMAD al reducir la amplitud del ruido aleatorio inherente a la electrónica empleada y las condiciones ambientales durante las lecturas espectrales.

La detección de trazas de metano en Marte por parte de la misión *ExoMars-TGO* tendría un gran valor científico, como se ha mencionado anteriormente. Con el fin de identificar posibles líneas de absorción débiles de  $\text{CH}_4$ , se pretende aplicar el método descrito en una serie de *scans* registrados por el canal SO de NOMAD. Estos *scans* corresponden a órbitas específicas con características geográficas y temporales de interés (véase la subsección 2.1.4). De esta manera, se pueden comparar los resultados obtenidos en diferentes estaciones y ubicaciones del planeta.

En el caso de detección negativa de metano, un objetivo adicional de este estudio es la derivación de límites superiores de detección de dicho gas en los espectros promediados. La determinación de la abundancia máxima de metano no solo permite cuantificar los posibles beneficios del promediado espectral, sino también realizar una evaluación más precisa de los límites de detección para este gas. Esta evaluación proporciona información valiosa sobre el incremento en sensibilidad y capacidad de detección que el método utilizado puede ofrecer, lo cual es crucial para futuras investigaciones y aplicaciones prácticas.

## 2 Metodología y desarrollo

### 2.1. Metodología

Tal y como ha sido introducido anteriormente, los espectros de transmisión que he utilizado en este trabajo pertenecen al instrumento NOMAD de la misión *ExoMars*-TGO. El método de funcionamiento de este instrumento, así como una descripción breve del mismo y dicho canal, se incluyen en esta sección.

Posteriormente se presenta el recorrido seguido para desarrollar el código que permite el promediado de los espectros y su visualización. Asimismo se explican una serie de puntos relacionados con los espectros de NOMAD y su promediado. También se muestran las motivaciones seguidas para la selección de los *scans* en base a las características asociadas a éstos.

#### 2.1.1. Espectroscopía por ocultación solar: TGO/NOMAD

##### 2.1.1.1. Espectroscopía por ocultación solar

Debido a la alta precisión requerida para la detección de gases traza, tanto ACS como NOMAD operan mediante la técnica de ocultación solar. En esta geometría de observación, el instrumento apunta directamente al disco solar y mide la irradiancia que atraviesa la atmósfera (transmitancia) en cada altura tangente durante el amanecer o el atardecer, lo que permite medir la absorción de la luz por los diferentes gases presentes en la atmósfera[23]. La radiación capturada se contrasta con mediciones exoatmosféricas, las cuales corresponden a alturas donde la atenuación atmosférica es despreciable. En el caso de Marte, éstas se ubican más allá de su exosfera a una altitud de 230 km aproximadamente. El cociente de ambas resulta en un espectro de transmisión a cada altura tangente, para un determinado rango de frecuencias espectrales.

Este proceso se lleva a cabo a diferentes alturas tangentes<sup>1</sup>, aumentando o disminuyendo en altitud durante cada amanecer (*egress scan*) o cada atardecer (*ingress scan*), respectivamente. Cada órbita de NOMAD alrededor de Marte contiene un amanecer y un atardecer. Finalmente, a partir de los espectros obtenidos a lo largo de las alturas seleccionadas, es posible derivar un perfil vertical de magnitudes que pueden derivarse de las líneas de absorción del espectro, como la temperatura o de la abundancia de diversos compuestos de la atmósfera.

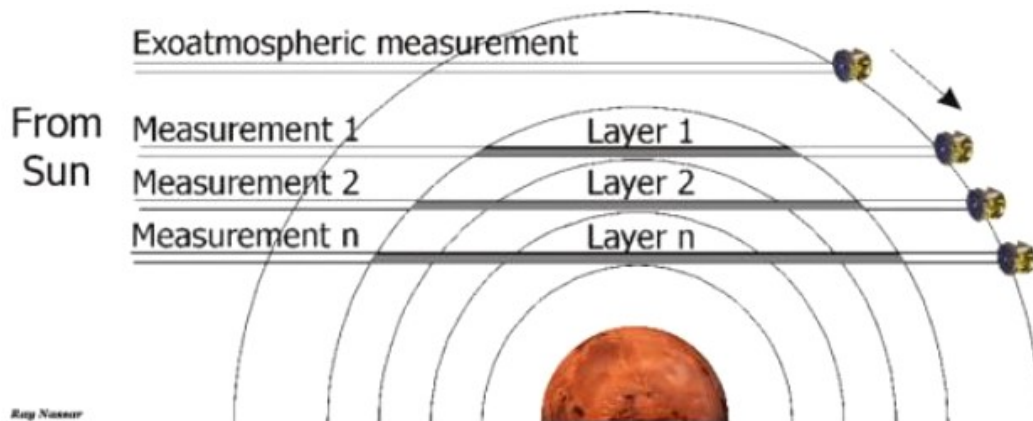


Figura 1: Ilustración del funcionamiento de la técnica espectroscópica de ocultación solar. Figura extraída de [24].

La ocultación solar proporciona la alta sensibilidad requerida para el objetivo en cuestión debido a dos razones principales: en primer lugar, la intensidad lumínica del Sol permite obtener espectros con una relación señal-ruido (SNR - *Signal to Noise Ratio*) muy elevada (2000-3000); y en segundo lugar, la longitud de camino óptico atmosférico<sup>2</sup> en esta geometría de observación es hasta 10 veces más extensa que la obtenida al observar la superficie del planeta[21]. Como resultado, esta técnica facilita la detección de líneas de absorción, y la determinación de abundancias de gases atmosféricos que, en ausencia de saturación de las líneas, puede llegar a precisiones del orden de una parte por mil millones (ppb)[23].

<sup>1</sup>Altitud o elevación del punto de observación en relación con el horizonte. En este caso, la altura tangente se mide desde el punto de vista del observador hacia el punto donde el haz de luz solar se encuentra tangente a la atmósfera marciana

<sup>2</sup>Distancia total que recorre la luz solar a través de la atmósfera desde el punto de ocultación hasta el observador. Representa la trayectoria seguida por los rayos de luz solar mientras atraviesan la atmósfera y llegan al detector o instrumento de medición.

### 2.1.1.2. El instrumento NOMAD

NOMAD es un conjunto de espectrómetros a bordo del orbitador TGO. Este instrumento realiza un minucioso estudio espectroscópico de la atmósfera marciana, abarcando longitudes de onda en el rango ultravioleta (UV), visible e infrarrojo (IR) que van desde 0.2 hasta 4.3  $\mu\text{m}$ . NOMAD consta de tres canales distintos: un canal exclusivo de ocultación solar (SO - *Solar Occultation*) que opera en el rango infrarrojo (2.2 - 4.3  $\mu\text{m}$ ), un segundo canal infrarrojo (2.2 - 3.8  $\mu\text{m}$ ) capaz de realizar observaciones de nadir<sup>3</sup>, pero también de ocultación solar y de límite (LNO - *Limb Nadir and solar Occultation*), y un canal ultravioleta/visible (UVIS - *Ultraviolet visible*, 200 - 650 nm) que puede funcionar en todos los modos de observación. Las capacidades espectrales de los canales SO y LNO superan las de las misiones previas en órbita en el infrarrojo en más de un orden de magnitud[25].

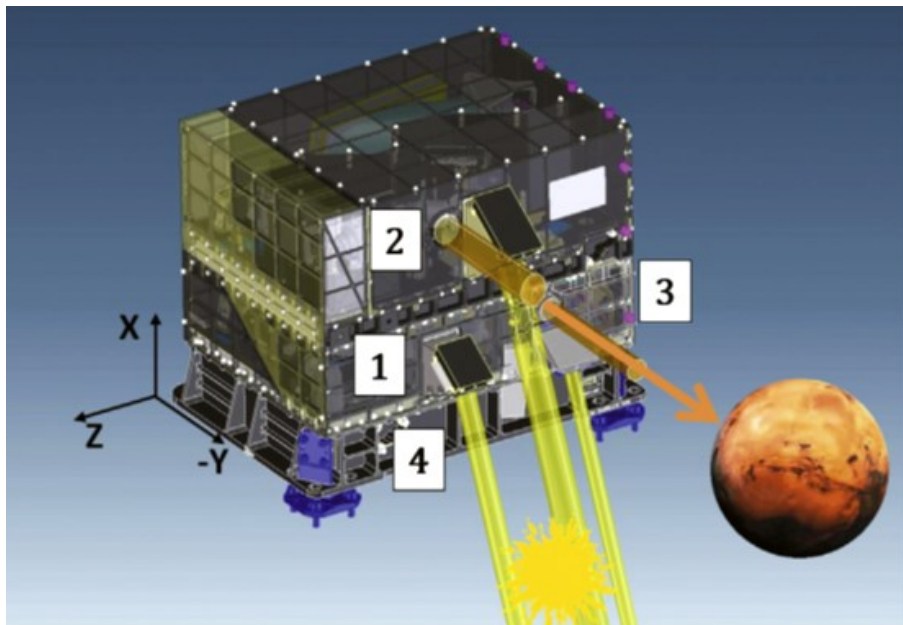


Figura 2: El instrumento NOMAD, con los canales SO (1), LNO (2) y UVIS (3), y la electrónica (4). También se indican las líneas de visión hacia el Sol (cilindros amarillos) y la dirección nadir (cilindros naranjas). Figura extraída de [25].

#### 2.1.1.2.1. El canal SO y el filtro AOTF

El canal SO es una adaptación de un espectrómetro ya existente llamado SOIR (*Solar Occultation in the InfraRed*), que formaba parte del conjunto de espectrómetros SPICAV (*SPectroscopy*

<sup>3</sup>Geometría de observación en la que los sensores o instrumentos se orientan de manera que su línea de visión intersecciona con la superficie del planeta. Esta técnica proporciona una vista directa y vertical de la atmósfera en el punto de observación.

for the Investigation of the Characteristics of the Atmosphere of Venus) a bordo de la misión *Venus Express* de la ESA[26]. El rango espectral que abarca es de 2.2 a 4.3  $\mu\text{m}$  y su campo de visión (FOV - *Field of view*) es de 30 x 2 minutos de arco. El canal está compuesto por una óptica de entrada, un filtro acusto-óptico sintonizable (AOTF - *Acousto-optic Tunable Filter*), una sección de espectrómetro que incluye una rendija y un espectrómetro de rejilla de difracción echelle, así como un conjunto de detectores infrarrojos criogenizados[27].

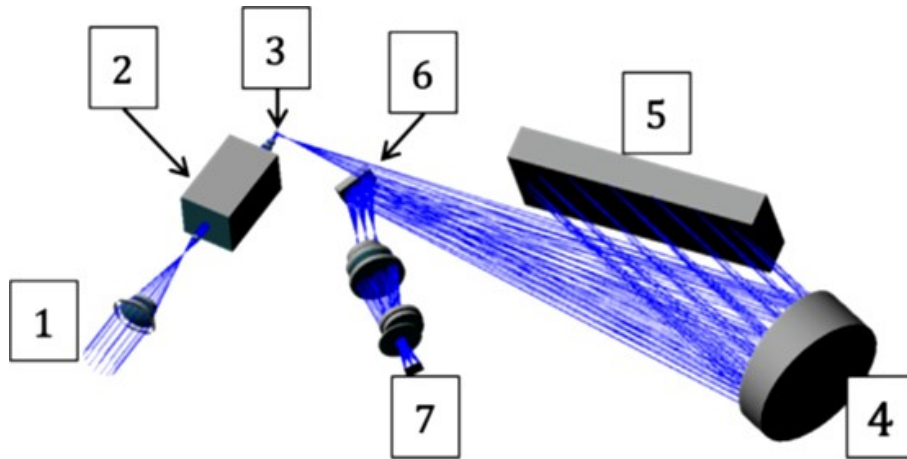


Figura 3: Esquema de los canales SO y LNO: (1) la óptica de entrada, (2) el filtro AOTF, (3) la rendija de entrada del espectrómetro, (4 y 6) espejos plegables, (5) la rejilla de echelle, (7) el detector. Figura extraída de [25].

El AOTF actúa como un filtro paso banda, seleccionando el intervalo espectral que se registra en el detector. El ancho de banda de este filtro se elige de manera que corresponda aproximadamente al Rango Espectral Libre (FSR) de la sección del espectrómetro echelle. El AOTF es controlado por radiofrecuencia, la cual se elige para cada orden de difracción de manera que el paso de banda del AOTF permita que la radiación del orden de difracción elegido llegue al detector. Los detectores del tipo *HgCdTe MARS-MW* de *Sofradir* en los canales SO y LNO contienen 320 columnas (dirección espectral) por 256 filas (dirección espacial) de píxeles. Durante las observaciones, se enfrían a 85K mediante un refrigerador criogénico rotatorio *RICOR K508HSM*, pero no todas las 256 filas del detector son iluminadas por el Sol durante una observación de ocultación solar, por lo que solo se leen las filas iluminadas durante cada adquisición de imagen[27].

La longitud de onda de la banda de paso del AOTF puede cambiarse de forma cuasi instantánea, lo que permite medir cualquier orden de difracción dentro del rango espectral del canal.

Sin embargo, debido a las limitaciones de volumen de datos de la nave espacial y consideraciones de relación señal-ruido, así como la incorporación de la electrónica heredada de SOIR, el canal SO solo puede capturar entre 5 y 6 órdenes de difracción por segundo durante una ocultación solar. Durante una observación en este canal, se sigue un patrón de periodicidad de 1 segundo, conocido como *ritmo*: se realizan mediciones de ocultación ciclando a través de los órdenes seleccionados dentro de este período y luego regresando al primer orden de difracción para comenzar nuevamente el ciclo en el siguiente período de ritmo. La información espacial se conserva en el proceso, ya que cada fila del detector tiene un campo de visión de aproximadamente 1 x 2 minutos de arco, lo que hace que cada una observe una sección distinta de la atmósfera. Durante un período de ritmo, el canal SO puede generar hasta 24 espectros[27].

Los datos que genera este canal son almacenados en ficheros conocidos como órbitas o *scans*. Cada *scan* contiene todos los espectros que se han registrado durante una ocultación solar, para cierto orden de difracción. El número de espectros en cada *scan* puede variar entre 70 y 500 aproximadamente, ya que la duración de cada ocultación oscila notablemente a lo largo de la misión, conforme el ángulo entre la órbita de TGO y la dirección del sol va cambiando (el llamado *ángulo beta*).

### 2.1.2. Promediado de espectros sintéticos

Como punto de partida de este estudio, desarrollé un código informático diseñado para, en primer lugar, realizar un promediado de espectros y sus ruidos instrumentales, y en segundo lugar, cuantificar la mejora de dicho promedio sobre la SNR y sobre la visualización de líneas de absorción débiles de gases traza. Con este fin, utilicé un espectro simulado que reflejasen diversas abundancias de gases traza, al cual agregué ruido aleatorio. Sometí dicho espectro a una serie de fases de modificación con el propósito de alcanzar condiciones que se asemejaran a aquellas observadas en los *scans* reales. Este enfoque me permitió mantener un control más preciso sobre las características del espectro, así como los efectos resultantes sobre éste al aplicarle el código.

El espectro simulado con el que trabajé se generó mediante KOPRA (*Kurucz Opacity Package for Radiative Transfer*)[28], un modelo de transporte radiativo línea-a-línea de última

generación, que ha sido desarrollado por la Universidad de *Karlsruhe* en colaboración con el IAA/CSIC.<sup>4</sup> El modelo KOPRA es una herramienta utilizada en astrofísica y ciencia planetaria para estudiar y simular la propagación de la radiación a través de medios estelares y atmosféricos. Éste se basa en la física del transporte radiativo, que describe cómo la radiación electromagnética interactúa con los materiales y se propaga a través de ellos. También permite obtener la opacidad, que es una medida de la capacidad de un material para absorber y dispersar la radiación, para determinar cómo la radiación se ve afectada a medida que atraviesa diferentes capas o medios. Esto permite el estudio de fenómenos como la formación de líneas espectrales, la transferencia de energía radiativa y la interacción de la radiación con la materia en entornos astrofísicos y planetarios[28].

KOPRA requiere dos tipos de información clave para realizar simulaciones realistas. La primera es una base de datos espectroscópica precisa, y en este estudio he utilizado la versión más reciente de HITRAN (Hitran 2022). La segunda es un perfil vertical que incluye presión, temperatura y abundancias de compuestos atmosféricos, el cual simula las condiciones esperadas en el lugar de observación de NOMAD. Para obtener este perfil, se extrajeron datos del modelo climático global de Marte llamado *Mars Planetary Climate Model*, desarrollado por el *Laboratoire de Meteorologie* de la Universidad de París. La lectura de ambas bases de datos (HITRAN y *Mars PCM*), así como la ejecución de KOPRA, se realizaron utilizando una herramienta de análisis de datos desarrollada en el IAA llamada *TGO Pre-Processing*[30], escrita en lenguaje *Python*. Esta herramienta se describe con más detalle en la sección 2.4.

### 2.1.2.1. Generación de espectros ruidosos a partir de un espectro simulado

Como ya introduje, la primera fase consistió en añadir una componente de ruido aleatorio al espectro simulado. Para generar los valores de ruido, utilicé una distribución gaussiana con una media de cero y una desviación estándar de 0.003. Seleccioné estos valores por dos razones: primero, la media de cero garantiza que al agregar el ruido a la señal, no se modifique

---

<sup>4</sup>La base de datos HITRAN (*High Resolution Transmission Molecular Absorption*) es una colección de información sobre la absorción de radiación electromagnética por moléculas en la atmósfera terrestre y otros medios. Fue desarrollada para proporcionar datos precisos y detallados sobre las características espectrales de los gases que interactúan con la radiación, como el dióxido de carbono, el ozono y el vapor de agua[29].



el continuo de transmisión<sup>5</sup> del espectro simulado original; segundo, la desviación estándar elegida es similar a la que se observa en el ruido real presente en los espectros medidos por el canal SO de NOMAD.

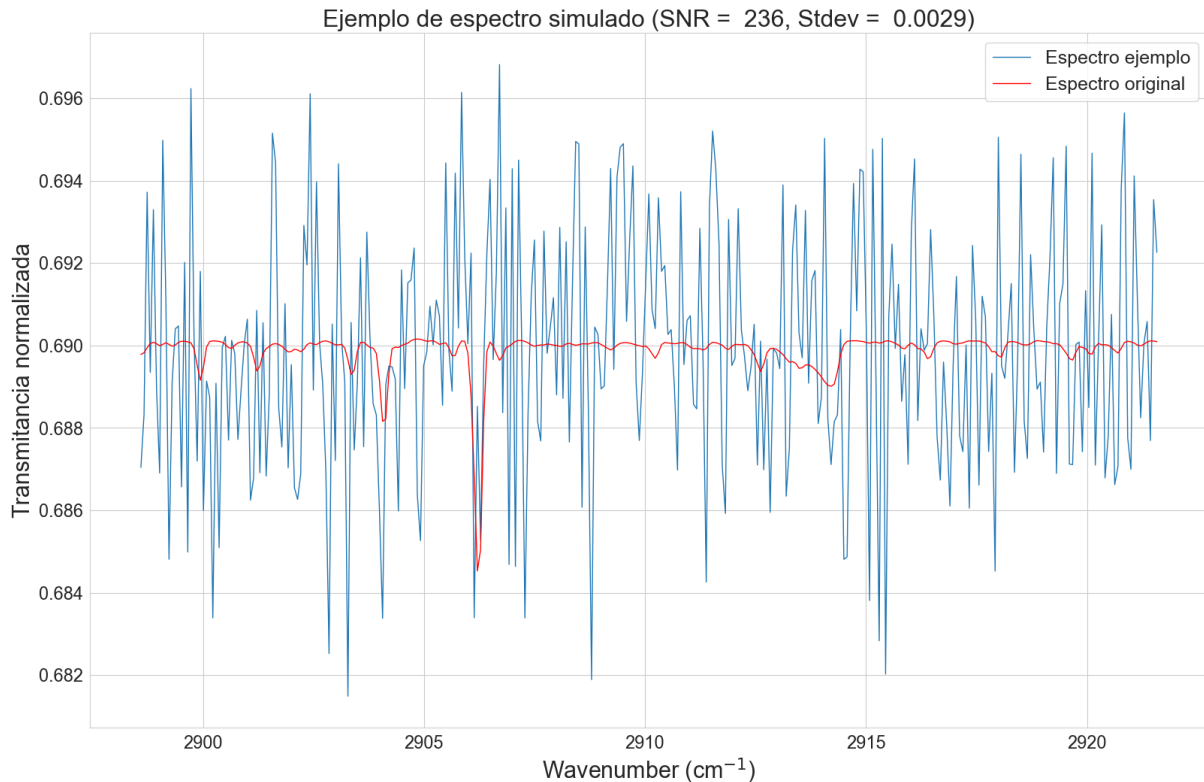


Figura 4: Espectro simulado (línea roja) y con ruido añadido (línea azul), el cual sigue una distribución gaussiana de media nula y desviación estándar de 0.003. El rango espectral de este espectro corresponde al asociado al orden de difracción 129.

El resultado de la adición de este ruido aleatorio se presenta en la Figura 2.4, que muestra una simulación del orden de difracción 129 de NOMAD. En esta figura, se pueden observar varias líneas de absorción asociadas al H<sub>2</sub>O. Luego, procedí a repetir el proceso generando múltiples espectros *ruidosos* con diferentes niveles de continuo para simular diversas cantidades de aerosoles (polvo en suspensión) en la atmósfera de Marte. Repartí estos espectros aleatoriamente alrededor de la posición ocupada por el espectro original para así reflejar la variabilidad de la profundidad del continuo de transmisión debido a la presencia de aerosoles en la atmósfera, los cuales bloquean la irradiancia de forma homogénea en una amplia región de frecuencias. En concreto, consideré que la repartición estuviese delimitada por la región

<sup>5</sup>El continuo de transmisión se refiere a la región del espectro electromagnético que atraviesa la atmósfera sin ser absorbida ni dispersada por los componentes atmosféricos. En esta región, la intensidad de la luz solar no experimenta cambios significativos debido a interacciones con gases presentes en la atmósfera.

contenida dentro del  $\pm 10\%$  del valor medio de de transmisión del espectro original. Con estas condiciones traté de reflejar, de forma aproximada, lo que se visualiza en la lectura de los espectros (calibrados y preprocesados) de un *scan* para una muestra de espectros tomados a altitudes cercanas.



Figura 5: Espectro simulado original (línea azul) y conjunto de 50 espectros *ruidosos* desplazados  $\pm 10\%$  alrededor del valor medio de transmisión del espectro original.

### 2.1.2.2. Alineamiento y promedio de espectros

A partir de este punto, procedí a desarrollar la sección del código responsable de promediar los espectros.

El primer paso considerado para este propósito fue realizar una alineación espectral antes de llevar a cabo el promedio, lo que garantiza que cada uno de los espectros tenga el mismo peso en el momento de realizar la operación de promediado. Físicamente, esta alineación consiste en normalizar los continuos de los distintos espectros, para que todos los espectros a promediar sean homogéneos en cuanto a la absorción de aerosoles. Concretamente, cada uno de los espectros se desplazó hasta un valor de transmisión común elegido sumándole la diferencia entre su continuo y dicho valor.

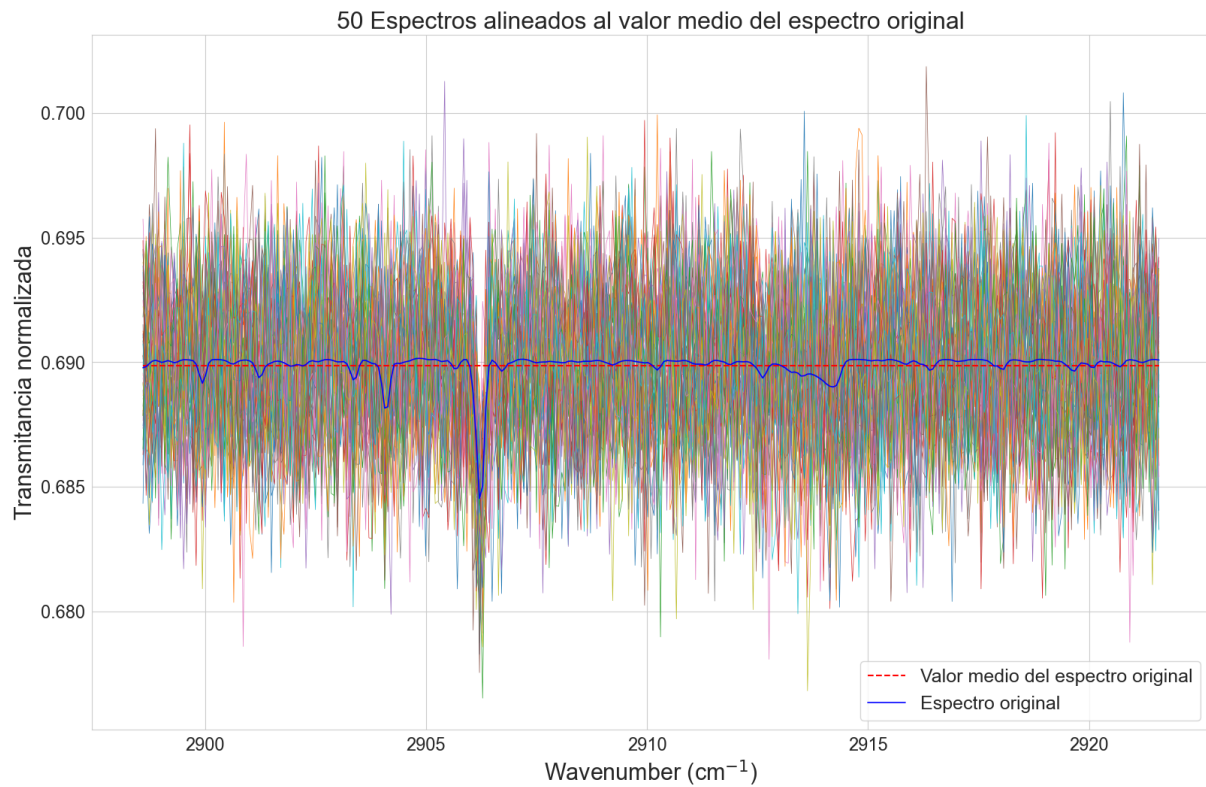


Figura 6: Alineación de los 50 espectros *ruidosos* al valor medio del espectro simulado original.

Finalmente, el promedio de los espectros se determinó siguiendo la operación habitual. Esto implica sumar elemento a elemento la transmitancia correspondiente a cada número de onda. Posteriormente, todos los valores resultantes se dividieron por el número de espectros involucrados en esa suma, obteniendo el espectro promedio. El resultado que se obtuvo después de este proceso se muestra en la Figura 7:

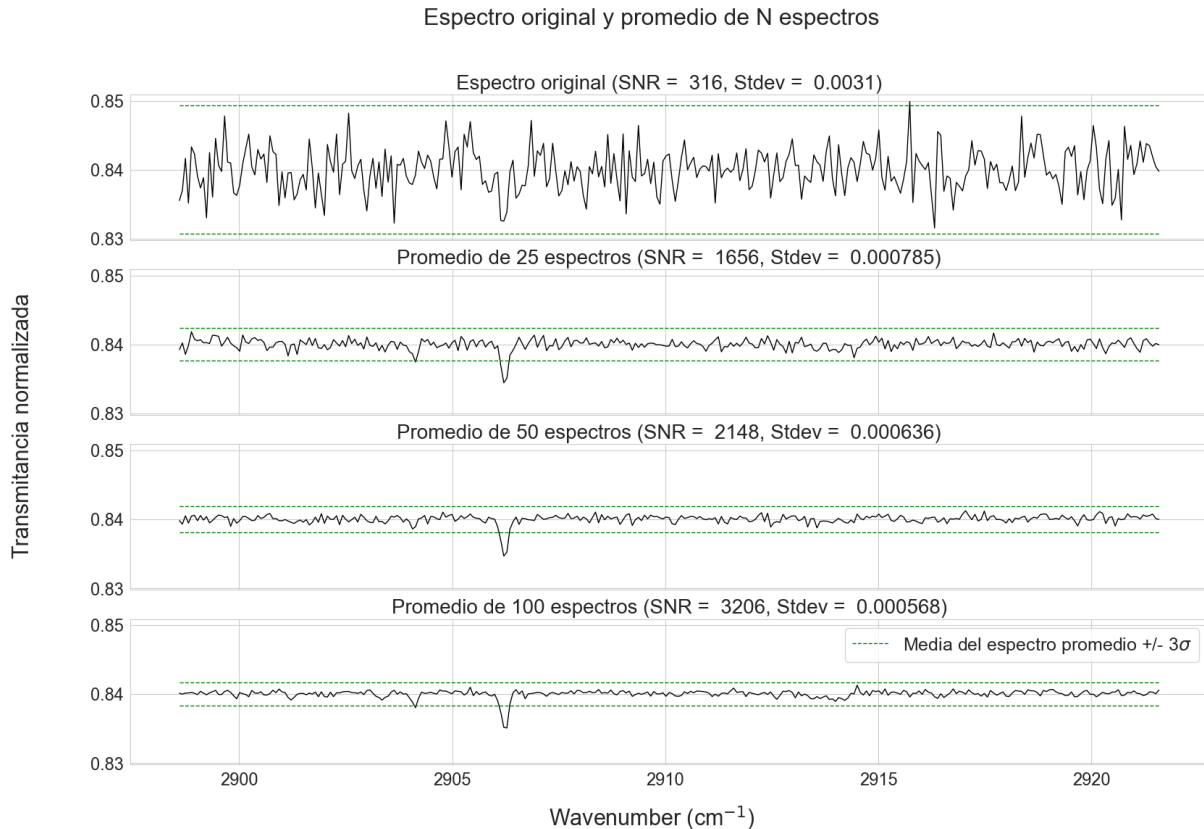


Figura 7: Espectro simulado original (panel superior) y promedios obtenidos a partir de 25, 50 y 100 espectros *ruidosos*. En el título de cada representación se indica el número de espectros utilizados en el promediado, así como la SNR y la desviación estándar ( $\sigma$ ) correspondientes. Las líneas verdes discontinuas provienen de desplazar el valor medio del promedio  $\pm 3\sigma$ . Se observa que el aumento de la SNR sigue la esperada proporcionalidad con  $\sqrt{N}$ .

### 2.1.3. Promediado de espectros de TGO/NOMAD

En el caso del promediado de espectros reales, seguí un procedimiento análogo al de los espectros sintéticos, con una diferencia: en relación al alineamiento, como mencioné previamente, los espectros fueron normalizados a un valor de transmisión común empleando como referencia sus respectivos continuos. Esto se debió a que, en el caso de los espectros reales, sí tuve a mi disposición los respectivos continuos de transmisión. La justificación de este hecho se detalla en el apartado 2.1.4.1. Consideré como valor de transmisión común la media de los continuos de los espectros seleccionados para el promedio, con el propósito de obtener una estimación de la transmitancia asociada al rango de alturas elegido.

A continuación, presento una serie de puntos relevantes para detallar el procesamiento previo de los espectros estudiados en este trabajo, así como dos aplicaciones adicionales, surgidas

y motivadas por este estudio con la intención de mejorar la calidad de dicho procesamiento.

Los espectros cuyo promediado he realizado en este trabajo provienen del *Pre-Processing*, un algoritmo que desempeña el "preprocesado" de los datos calibrados de NOMAD. Se trata de una herramienta desarrollada en el IAA (Instituto de Astrofísica de Andalucía) y es utilizada para el análisis rutinario de los datos calibrados de nivel 1 de NOMAD[31]. Al igual que el código desarrollado en este trabajo, está escrita en *Python*, y su objetivo principal es corregir ciertos defectos en la lectura instrumental. Entre los más importantes se encuentra uno que afecta a todos los órdenes de difracción: una pendiente artificial que causa una curvatura o *bending* en los datos, debido a variaciones semi-aleatorias en la temperatura del detector. Este defecto es sistemático pero variable de una altura a otra y de una órbita a otra. Para lograr la corrección de esta curvatura y otros defectos relacionados con la calibración, el *Pre-Processing* utiliza simulaciones detalladas proporcionada por KOPRA. Estas simulaciones son altamente realistas y se utilizan para "limpiar" la curvatura espectral y las imprecisiones de la calibración. Además de esto, el *Pre-Processing* también extrae información clave, como la latitud, longitud, estación y altura, a partir de simulaciones del *MarsPCM*<sup>6</sup>. Con el fin de simular espectros comparables a los de NOMAD, KOPRA requiere conocer características fundamentales como la resolución espectral, el rango de frecuencias, las alturas tangentes de observación, el tamaño del campo de visión y los detalles de la respuesta espectral[30].

A continuación se presenta con más detalle las dos correcciones de segundo orden que realiza el *Pre-Processing*: la determinación del nivel del continuo y la corrección de la curvatura espectral.

1. En la primera corrección, se utilizan simulaciones de KOPRA que incluyen la absorción de aerosoles. Se comparan estos espectros simulados con los espectros de NOMAD en la región central del orden para ajustar y corregir el nivel del continuo.
2. En cuanto a la segunda corrección, se corrige el efecto de curvatura al ajustar cada espectro a un polinomio de cuarto grado. Para ello, se comparan los espectros obtenidos con las simulaciones de KOPRA, que no presentan curvatura debido a su naturaleza simulada. Estas simulaciones se modifican añadiendo una cantidad específica de absorción por

---

<sup>6</sup>El *MarsPCM* es un modelo que proporciona una representación detallada de la composición química y mineralógica de Marte, basada en datos observacionales y algoritmos especializados.



aerosoles, ya que las simulaciones de KOPRA no consideran la absorción de aerosoles. Al comparar los espectros, se puede inferir un polinomio de cuarto grado que describe la curvatura instrumental. Luego, se realiza una *reducción* de este polinomio de los datos, lo que resulta en un espectro prácticamente plano. Además de esta corrección, este proceso proporciona una estimación de la opacidad de los aerosoles a diferentes alturas tangentes.

Aún contando con la complejidad y el potencial de esta herramienta, la corrección del *bending* no es perfecta, ya que el uso de un polinomio es una aproximación para describir un defecto instrumental no del todo conocido, además de variable. Como resultado, después de aplicar el *Pre-Processing*, un espectro contiene varias componentes oscilantes adicionales, con una frecuencia mucho menor que las componentes propias de la señal. La magnitud de esta oscilación, conocida como "*bending* residual", depende en gran medida del espectro específico y, por ende, del *scan* correspondiente.

Dichas oscilaciones pueden ser superiores al ruido instrumental y perjudicar a la hora de promediar espectros, lo que a su vez conlleva la pérdida de información relevante en los promedios resultantes. Esto motivó un objetivo adicional en relación a este hecho: encontrar un método para corregir estas oscilaciones, el cual se presenta en el siguiente apartado 2.1.3.1.1.

#### **2.1.3.0.1. Corrección del *bending* residual. La transformada *wavelet*.**

Para eliminar los residuos sistemáticos, conocidos como *bending* residual, que se presentan después del *Pre-Processing* de los datos calibrados de NOMAD, consideré hacer uso de la transformada *wavelet*[32]. Esta técnica matemática se utiliza para analizar y procesar señales o datos en diferentes escalas de tiempo o frecuencia, ofreciendo una representación más detallada y precisa que otras técnicas de análisis de señales, como la transformada de *Fourier*. La transformada *wavelet* descompone la señal utilizando pequeñas ondas conocidas como *wavelets*, que son funciones matemáticas definidas y localizadas tanto en el tiempo como en la frecuencia. Dicha descomposición de la señal original se realiza en diferentes niveles de detalle. En cada nivel, la señal se filtra y divide en componentes de alta y baja frecuencia. Los coeficientes de la transformada *wavelet* representan la contribución de cada nivel de detalle y

proporcionan información sobre las características específicas presentes en la señal a diferentes escalas[33].

Una vez realizada la descomposición de la señal, la componente de menor frecuencia, que está principalmente asociada al *bending* residual mencionado previamente, se elimina. Luego, el espectro se reconstruye con las componentes restantes. De esta manera, se logra eliminar este defecto oscilante de la señal. Sin embargo, este método no es perfecto y puede introducir algunas modificaciones en la forma del espectro y, por tanto, en la información contenida en el mismo.

Para los espectros analizados en este trabajo, la función *wavelet bior3.9*[34] (*biorthogonal*) proporcionó los mejores resultados al minimizar la alteración de la información contenida en la señal, después del filtrado de la componente de menor frecuencia. Un ejemplo de cómo actúa el método descrito usando dicha función se muestra en la siguiente figura:

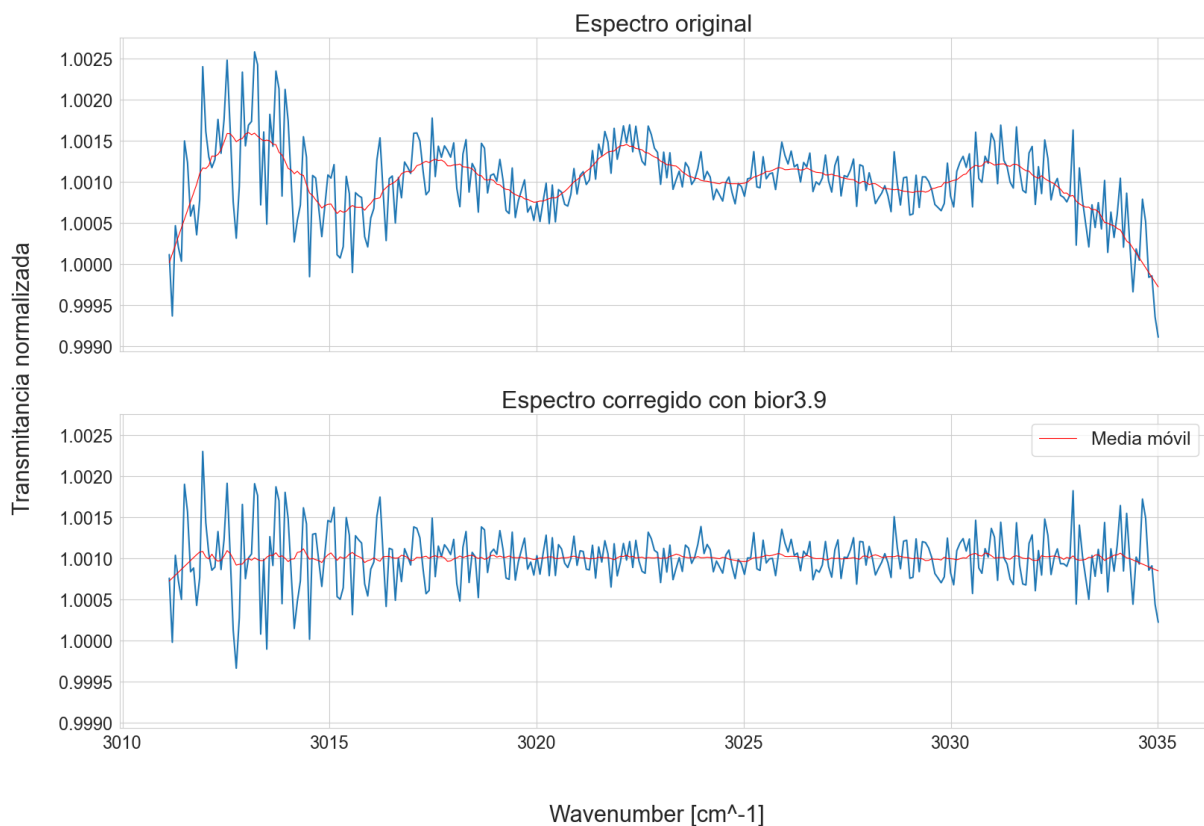


Figura 8: Ejemplo del efecto del filtrado de baja frecuencia espectral mediante la transformada *wavelet* en un espectro real tomado por NOMAD a gran altura ( $\approx 84$  km). En concreto, se muestra el resultado tras la aplicación de la función *wavelet bior3.9*. En el panel superior se representa el espectro real, mientras que en el inferior se muestra ese mismo espectro una vez realizado el filtrado. También se ha indicado la media móvil<sup>7</sup> en cada uno (línea roja) para mostrar con más claridad la curvatura de baja frecuencia de las señales.

Las wavelets biortogonales destacan por su capacidad para representar eficientemente señales con características tanto de alta frecuencia como de baja frecuencia. Otra característica distintiva de las wavelets biortogonales es que están diseñadas para tener una propiedad de reconstrucción simétrica, lo que implica que se puede reconstruir la señal original a partir de sus coeficientes wavelet sin pérdida de información (en el caso de conservarse todas las componentes de la señal). En la notación *biorN.M*, el parámetro *N* indica el número de coeficientes de la función wavelet madre, lo que define su longitud y está relacionado con la resolución en el dominio del tiempo. Un valor mayor de *N* proporciona una función wavelet con mayor resolución temporal, capturando detalles más finos en la señal. Por otro lado, un valor menor de *N* resulta en una función wavelet más ancha en el tiempo y menos sensible a los detalles de alta frecuencia. El parámetro *M*, por otro lado, se refiere al número de coeficientes de la función wavelet padre, que se utiliza en la reconstrucción de la señal original a partir de sus componentes descompuestos. Al igual que el parámetro *N*, el valor de *M* también afecta la resolución temporal, pero en el contexto de la función wavelet padre. Un valor mayor de *M* proporciona una función wavelet padre con mayor resolución temporal, permitiendo una mejor reconstrucción de los detalles de la señal original[35].

#### 2.1.3.0.2. Mejora de la determinación del continuo

Contar con el valor del continuo de transmisión de cada espectro es fundamental para realizar el promedio. Esto se debe a una razón similar a la de "alinear" los espectros antes del promedio, pero con un nivel de precisión mucho mayor. Como se ha mencionado anteriormente, el nivel de continuo de cada espectro se estima mediante el *Pre-Processing*, utilizando la cantidad óptima de aerosoles que produce el mejor ajuste de la curvatura instrumental. Este valor óptimo se encuentra dentro de un conjunto de valores de opacidad en el que se basa el programa.

Para poder promediar los espectros y conservar la máxima información relevante posible, especialmente al tratar de determinar o estimar la abundancia máxima de un gas minorita-

---

<sup>7</sup>La media móvil implica calcular el promedio de los valores de amplitud o intensidad de la señal dentro de un rango de frecuencias específico. Este rango puede ser definido por un ancho de banda fijo o por un número determinado de puntos de frecuencia. Se utiliza para suavizar el ruido y resaltar características importantes en un rango de frecuencias determinado.



rio como el metano, consideré necesario realizar una corrección adicional a la estimación del continuo que resulta del *Pre-Processing*. Esta corrección consistió en ampliar los intervalos espectrales que se usan para estimar la opacidad del continuo, ampliando por tanto el número de frecuencias (que hasta ese momento era de sólo 100 valores) utilizadas para ello. Aumentar esta longitud lo suficiente implica incrementar la resolución de la opacidad, lo que permitió al programa determinar el continuo con un menor margen de error. La reducción de este error está directamente relacionada con el número de valores de opacidad empleados en el cálculo de la estimación.

Para cuantificar la mejora conseguida con el aumento de la cantidad de valores, tomé la diferencia entre el valor de transmisión para una frecuencia concreta y el estimado por el *Pre-Processing*. Dicha frecuencia se encuentra posicionada aproximadamente en el centro del orden, lugar caracterizado por el hecho de que, por lo general, la curvatura instrumental introducida en 2.1.3.1 es menor en el mismo. Esto lo hice para todos los espectros incluidos en el *scan* correspondiente, es decir, para todas las alturas tangentes del mismo.

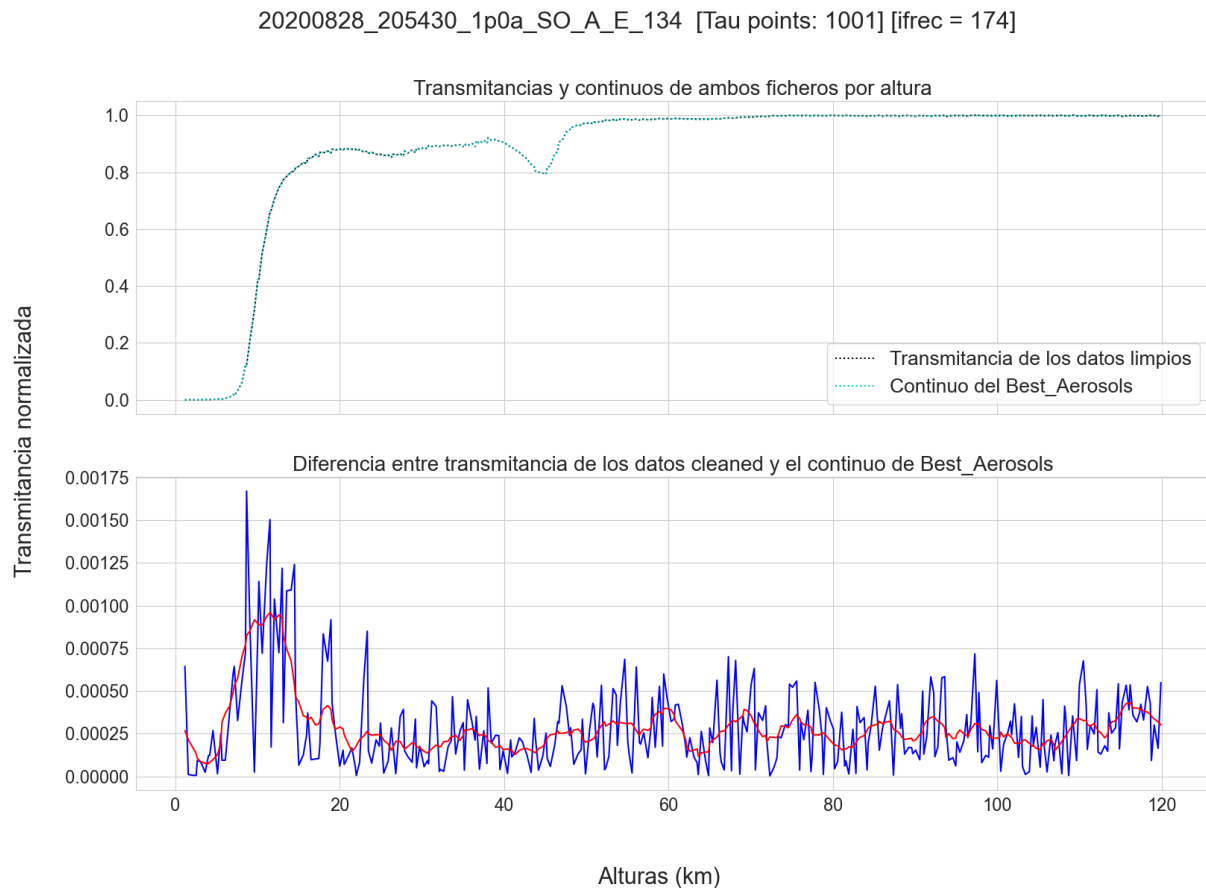


Figura 9: Valor de transmisión del espectro y del continuo (obtenido a partir del *Pre-Processing*) para todo el rango de alturas del *scan 1* (panel 1) y diferencias entre ambos valores (panel inferior, donde la línea roja es la media móvil para una mejor visualización). El parámetro *ifrec* indica que tanto los valores de transmisión como del continuo corresponden a la frecuencia de índice 174 del vector de frecuencias que caracteriza a los espectro, el cual se compone de 320 valores. Dicho índice está asociado aproximadamente con el centro del orden 134. Por otro lado, *Tau\_points* indica el número de valores de frecuencia totales usados para la estimación de la opacidad a cada altura.

Tras realizar varias pruebas, determiné que una longitud de 1000 puntos era suficiente, ya que más allá de ese número no observé una mejora apreciable en los continuos estimados, además del excesivo aumento en el consumo computacional en comparación con la mejora obtenida.

Es importante destacar que, hasta la fecha, el equipo del IAA/CSIC que ha estado trabajando en el desarrollo de del *Pre-Processing* no había realizado un análisis tan exhaustivo del continuo

de los espectros de NOMAD, ni había llevado a cabo un estudio cuantitativo de la curvatura residual tras el ajuste polinómico del continuo en los datos de NOMAD. Sin embargo, a partir de este trabajo, se ha prestado especial atención en el IAA/CSIC al nivel de precisión en el cálculo del continuo utilizando esta herramienta.

#### **2.1.3.1. Estimación del límite superior de detección de metano**

En el caso de no llegar a identificar metano después de hacer los promedios pertinentes en las órbitas seleccionadas, y para cuantificar el grado de mejora que el método desarrollado puede aportar, establecí una forma de derivar el límite de abundancia máxima de metano en los promedios realizados. Esto lo hice gracias a los resultados aportados por E.W. Knutsen y su equipo en su artículo publicado en 2021[36]. Una parte de dicho estudio se dedicó a estimar la abundancia máxima de metano a partir de un espectro de NOMAD del orden de difracción 134, el mismo orden estudiado en este trabajo.

A continuación, en la Figura 10 se presenta una figura del estudio realizado por Knutsen et al., la cual utilicé para obtener el límite superior de concentración de metano. En dicho estudio se utilizaron simulaciones de metano mediante KOPRA para indicar la posición y profundidad de las líneas de absorción de metano para concentraciones de 10 y 0.4 ppbv. También éstas se emplearon en la derivación de abundancias máximas de metano. Dado que no disponía de simulaciones de metano propias en el momento de realizar los promedios, consideré tomar el valor de absorción asociado a la línea de absorción de CH<sub>4</sub> más intensa de la simulación para 10 ppbv, ubicada en 3017.7 cm<sup>-1</sup>, según se muestra en la figura mencionada.

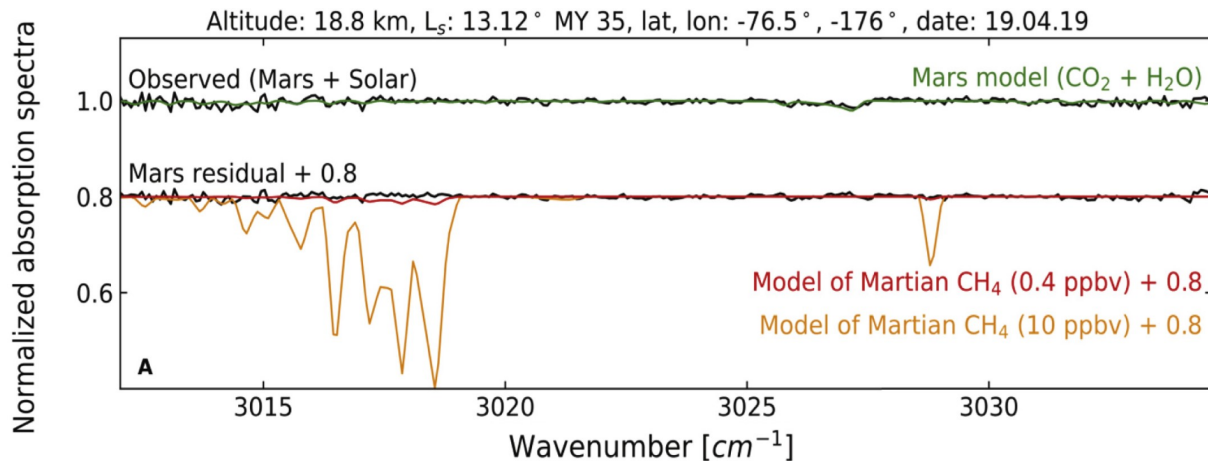


Figura 10: Panel A de la Figura 8 de Knutsen et al. (2021)[36]. Los espectros observados se muestran en negro, el ajuste del modelo PSG<sup>8</sup> a los principales gases (H<sub>2</sub>O y CO<sub>2</sub>) en verde, y los espectros sintéticos de CH<sub>4</sub> en rojo y naranja. El espectro rojo con una abundancia de 0.4 ppbv se utiliza para visualizar el nivel de fondo previamente observado, mientras que el espectro naranja con una abundancia de 10 ppbv simula un evento esporádico de emisión.

A partir de este valor de absorción (0.4) y su correspondiente abundancia (10 ppbv), obtuve una relación lineal entre ambas cantidades, teniendo en cuenta que el origen de la recta que describe la función asociada debe pasar por el punto de origen. La pendiente ( $m$ ) de esta recta fue de 25 ppbv por valor de absorción.

Una vez obtenida dicha relación, seguí la siguiente estrategia para determinar la abundancia máxima de metano en los espectros promediados:

1. El valor de absorción se obtiene restando al valor del continuo el valor de transmitancia correspondiente a la frecuencia de  $3018 \text{ cm}^{-1}$ , de manera similar a como se hizo en la simulación del metano.
2. Luego, se compara este valor de absorción con la desviación estándar móvil ( $\sigma$ ) del promedio, que se calcula en una región del espectro aparentemente libre de líneas de absorción significativas. Dado que se trata de un espectro de transmisión, el valor de la desviación estándar se toma como la unidad menos su valor inicial, y así poder realizar la comparación en términos de absorción.
3. En caso de que la magnitud de la absorción sea menor que la desviación estándar de

<sup>8</sup>El PSG (*Planetary Spectrum Generator*) es un software desarrollado por la NASA que permite simular y modelar espectros planetarios, incluyendo Marte. Este software utiliza modelos y datos disponibles para recrear las condiciones atmosféricas y composición química de Marte, generando espectros sintéticos que se asemejan a los espectros observados por los instrumentos a bordo de distintas misiones espaciales[37].

absorción, se considera que el límite corresponde al valor de la desviación estándar multiplicada por  $m$ . Si la magnitud de la absorción es mayor que la desviación estándar, se verifica que el valor de la absorción también sea mayor que tres veces  $\sigma$ . Si se cumple esta condición, se contempla la posibilidad de la existencia de la línea de absorción de metano en el espectro y, por lo tanto, la presencia del gas. En tal caso, la abundancia se determina a partir del valor de absorción calculado multiplicado por  $m$ .

Asimismo, consideré comprobar si el efecto de la corrección del *bending* residual suponía una mejora en los valores de abundancia máxima.

#### 2.1.4. Selección de datos de NOMAD

Los 9 *scans* analizados en este trabajo, recogidos en la Tabla 1, los escogí con el propósito de obtener información espectroscópica sobre la posible presencia de diversas ubicaciones de interés en Marte. Basé esta selección en parámetros geográficos y temporales, como la latitud, el año marciano y el ángulo solar<sup>9</sup> ( $L_s$ ). En conjunto, estos parámetros representan una serie de características, indicadas también en la tabla, que intervienen en las condiciones atmosféricas, y por tanto en la calidad de los espectros medidos.

---

<sup>9</sup>Se refiere al ángulo de incidencia del Sol sobre la superficie de un cuerpo celeste, medido en relación con una línea de referencia. En el caso específico de Marte, se define como el ángulo entre la línea que conecta el Sol y el centro de Marte, y el punto en la órbita de Marte donde se encuentra su perihelio (punto más cercano al Sol) y se utiliza para medir la posición estacional del planeta en su órbita alrededor del Sol.

#	Scan seleccionado	L <sub>s</sub>	Latitud	Año marciano	Comentarios
1	20200828_205430_1p0a_SO_A_E_134	267,24°	59,3° S	35	Hemisferio norte/sur. Solsticio de verano o cerca del perihelio, cuando hay mucho polvo en la atmósfera y el H <sub>2</sub> O sublima desde el polo sur.
2	20181030_074553_1p0a_SO_A_I_134	278,78°	59,1° S	34	
3	20200831_000045_1p0a_SO_A_E_134	268,58°	59,0° N	35	
4	20181030_062854_1p0a_SO_A_E_134	278,75°	56,0° N	34	
5	20180610_085321_1p0a_SO_A_I_134	190,75°	71,8° N	34	Antes del inicio de la <i>Great Dust Storm</i> (GDS)
6	20200813_211146_1p0a_SO_A_E_134	257,76°	57,2° N	34	Durante la fase de decaimiento de la GDS.
7	20191122_182741_1p0a_SO_A_I_134	110,50°	63,0° N	35	Hemisferio norte/sur. Mediados del verano, cuando la capa de hielo norte sublima.
8	20191208_182741_1p0a_SO_A_E_134	117,88°	58,7° S	35	
9	20190716_001551_1p0a_SO_A_E_134	53,21°	44,7° S	35	Temporada de afelio, muy fría y sin polvo. Hielo de H <sub>2</sub> O en la franja ecuatorial.

Tabla 1: Listado de los nueve *scans* u órbitas de NOMAD seleccionados para este estudio. Ver texto para más detalle.

Con el objetivo de detectar metano o, al menos, establecer límites superiores de detección, llevé a cabo una búsqueda en el orden de difracción 134 (3010-3034 cm<sup>-1</sup>) del instrumento NOMAD. Me enfoqué en este orden en base a las simulaciones de líneas de absorción de diversos gases realizadas con KOPRA. Estas simulaciones mostraron que algunas de las líneas de absorción más intensas de CH<sub>4</sub> se encuentran dentro de este rango de frecuencias. Esta elección se fortaleció por el hecho de que la mayoría de las líneas de metano en este orden están localizadas en frecuencias donde las líneas de otros gases suelen ser más débiles (vapor de agua o CO<sub>2</sub>). De esta manera, busqué realizar un análisis menos influenciado por la presencia de otros gases con concentraciones significativas, los cuales pueden ocultar las posibles líneas de CH<sub>4</sub> o afectar a la estimación de la cantidad máxima detectable de metano por el instrumento NOMAD.

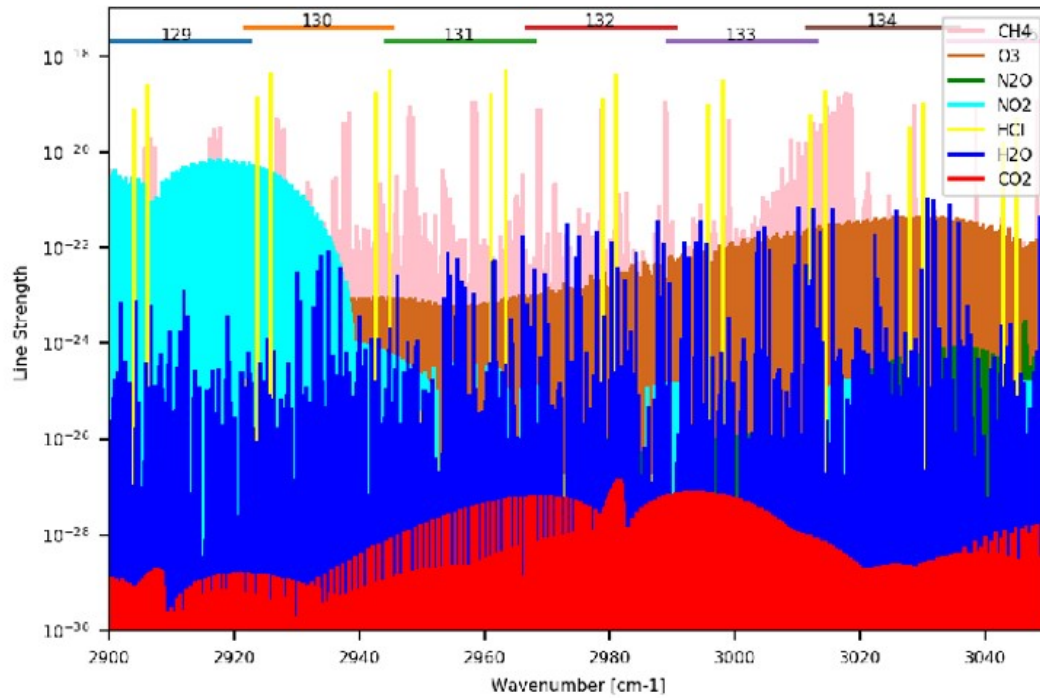


Figura 11: Intensidad de las líneas de absorción desde el orden de difracción 129 hasta el 134 (HITRAN).

Una vez elegido el orden de difracción, un segundo criterio que tuve en cuenta en la selección de las órbitas fue la opacidad atmosférica a diferentes alturas, la cual es proporcionada por el *Pre-Processing*. Debido fundamentalmente a los aerosoles en suspensión (polvo y hielo) presentes en la atmósfera de Marte, el valor del continuo de transmisión en los espectros puede verse alterado. Además, la opacidad también puede provocar un aumento en la distorsión de la radiancia registrada, lo que se traduce en un peor SNR del espectro. Es por ello por lo que realicé una búsqueda exhaustiva de *scans* que manifestaran un perfil de opacidad por altura lo más "limpio" posible. Un ejemplo de este perfil, correspondiente a una de las órbitas escogidas más libre de aerosoles, se presenta a continuación en la Figura 12:

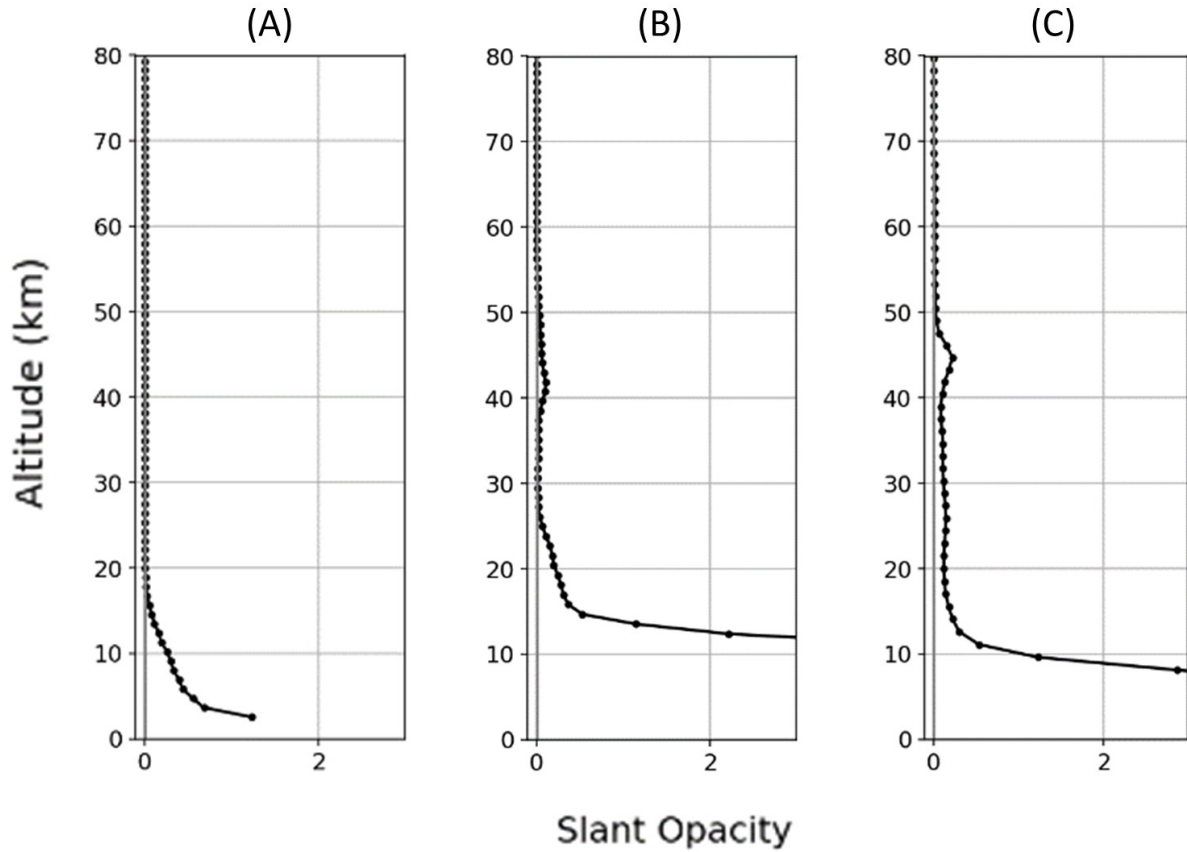


Figura 12: Perfiles de opacidad correspondientes a tres de los *scans* escogidos para aplicar el método del promediado. Identificación de las órbitas: (A): 20191208\_182741 (#8), (B): 620200813\_211146 (#6), (C): 120200828\_205430 (#1).

## 2.2. Resultados

### 2.2.1. Promedios de los *scans* seleccionados

Después de seleccionar las 9 órbitas o *scans* más relevantes, apliqué el método del promedio a cada uno de ellos. Realicé el promediado en intervalos de altura de 8 km, comenzando desde la altura tangente mínima disponible en cada *scan* y llegando a una altura máxima cercana a los 50 km. Al elegir el intervalo específico, realicé una inspección visual de los espectros para garantizar que no estuviera promediando espectros con características muy diferentes entre sí, lo que me permitió preservar la mayor cantidad posible de información espectroscópica en



el promedio. Como resultado, el número de espectros incluidos en la "ventana" de alturas para el promediado fue menor que si hubiera utilizado un intervalo más amplio.

En esta sección se muestran, para las 5 órbitas más significativas en cuanto a características geográficas y estacionales (véase figura 2.11), una representación de los promedios resultantes calculados en intervalos de altura tangente de: (0 - 8), (16 - 24) y (40 - 48) km. Se seleccionaron los dos primeros espectros debido a que corresponden a la región con mayor absorción de gases, a pesar de tener una mayor presencia de aerosoles, la cual dificulta la visualización de picos de absorción en algunas órbitas. El tercer espectro se eligió con el propósito de ilustrar de manera más clara el efecto del *bending* residual en los espectros. Asimismo, se indican sus rasgos principales, como los picos de absorción característicos (de H<sub>2</sub>O y HCl) y la desviación estándar, así como el continuo de transmisión y su relación con el perfil de opacidad correspondiente. Dicha desviación estándar, asociada al error aleatorio de la señal, la calculé dentro de los límites de una región de frecuencias aparentemente libre de líneas de absorción (3027.7 - 3029.7 cm<sup>-1</sup>). También se incluyen, acompañando a cada representación, una visualización del efecto derivado de aplicar el filtrado del *bending* residual.

### 2.2.1.1. Scan 1: 20200828\_205430 (Hemisferio sur. Solsticio de verano)

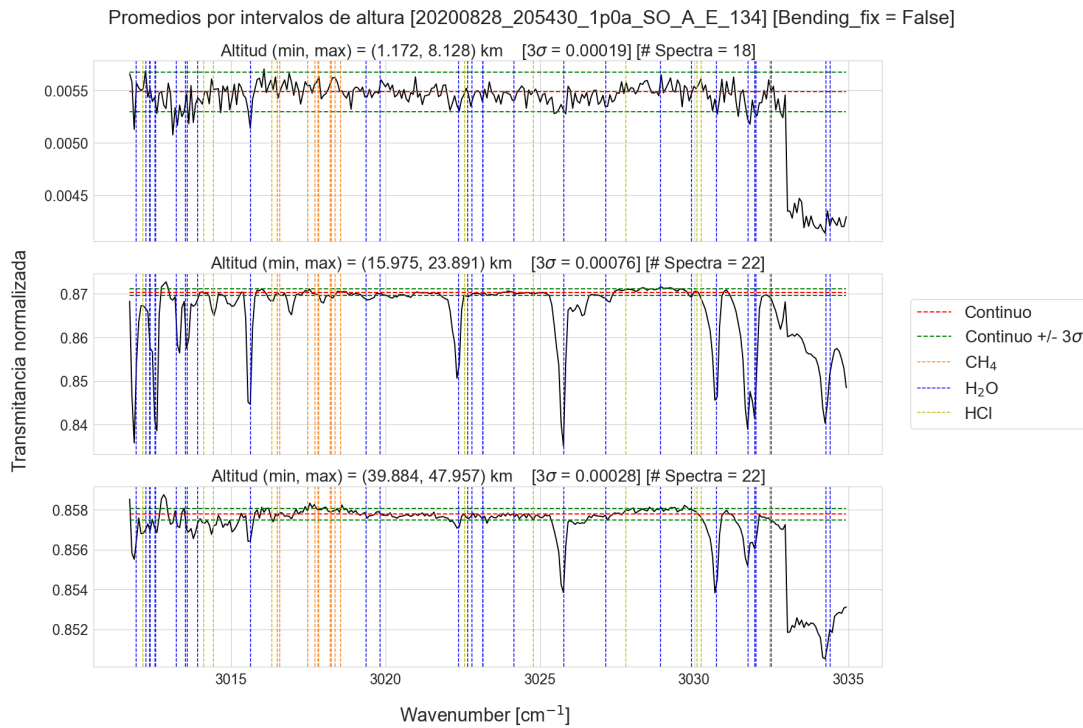


Figura 13: Promedios (líneas negras) del *scan* 120200828\_205430 a intervalos de altura tangente de (0 - 8), (16 - 24) y (40 - 48) km. Se muestran los respectivos continuos (líneas rojas discontinuas) y el intervalo  $\pm 3\sigma$  alrededor de los mismos (líneas discontinuas verdes), así como las frecuencias asociadas a las líneas de absorción más intensas de  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{HCl}$  para el rango de frecuencias indicado (líneas discontinuas verticales naranjas, azules y amarillas, respectivamente). El resto de figuras son análogas en cuanto a esta información.

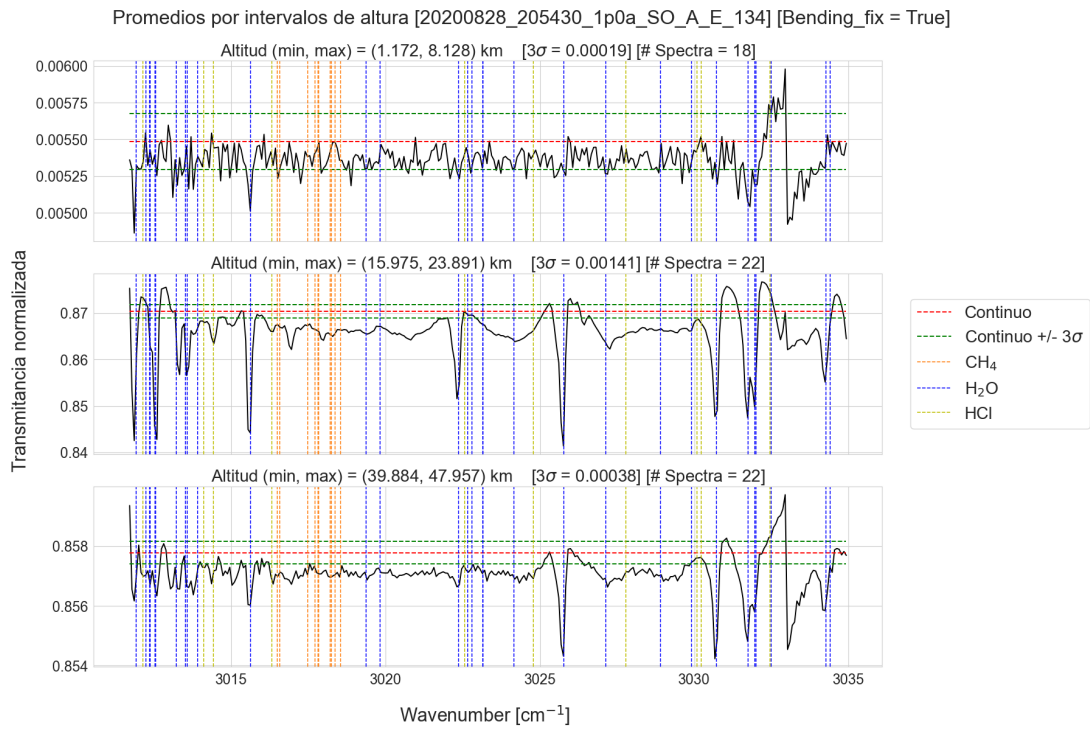


Figura 14: Efecto del filtrado de baja frecuencia mediante la transformada *wavelet* en los promedios del *scan* 1: 20200828\_205430.

2.2.1.2. *Scan* 5: 20180610\_085321 (Antes del inicio de la GDS)

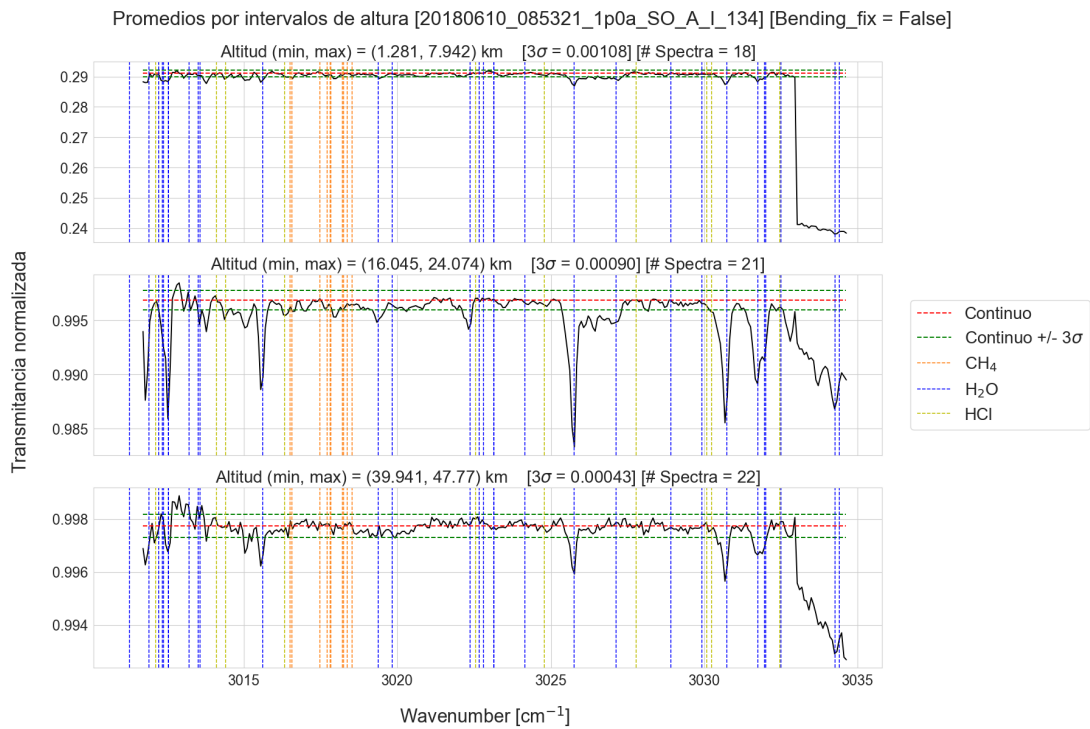


Figura 15: Promedios del *scan* 5: 20180610\_085321.



Figura 16: Efecto del filtrado de baja frecuencia mediante la transformada *wavelet* en los promedios del *scan* 5: 20180610\_085321.

2.2.1.3. Scan 6: 20200813\_211146 (Durante la fase de decaimiento de la GDS)

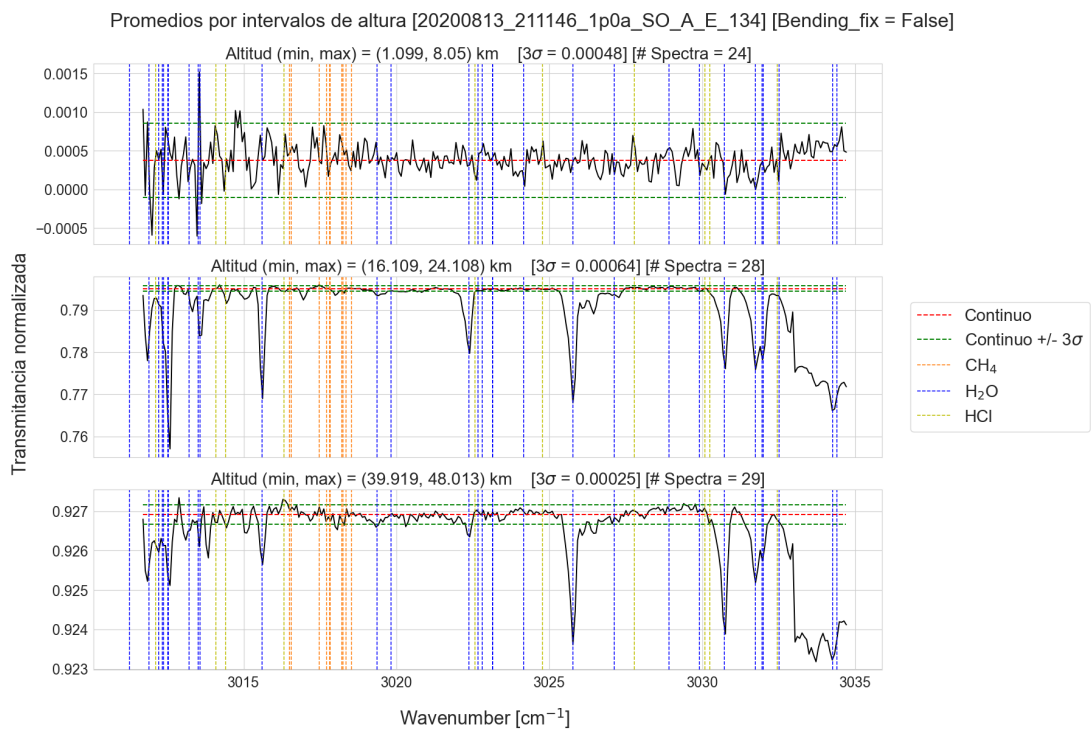


Figura 17: Promedios del *scan* 6: 20200813\_211146.

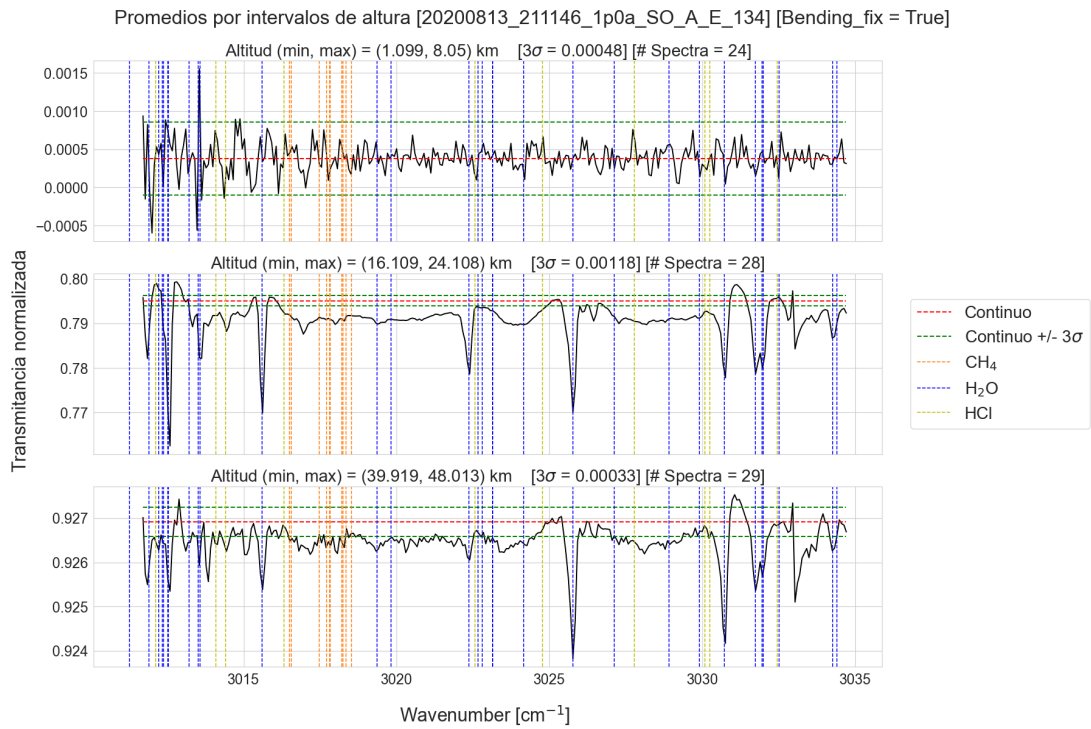


Figura 18: Efecto del filtrado de baja frecuencia mediante la transformada *wavelet* en los promedios del *scan* 6: 20200813\_211146.

2.2.1.4. Scan 8: 20191208\_182741 (Hemisferio norte. Medios del verano)

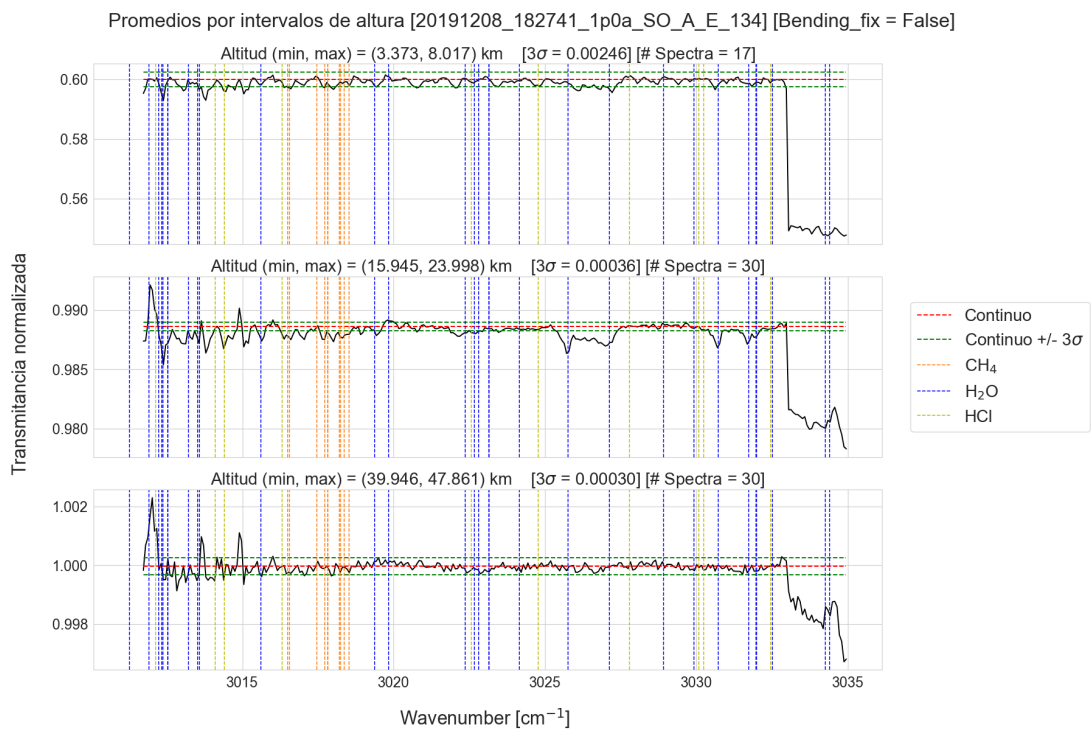


Figura 19: Promedios del *scan* 8: 20191208\_182741.

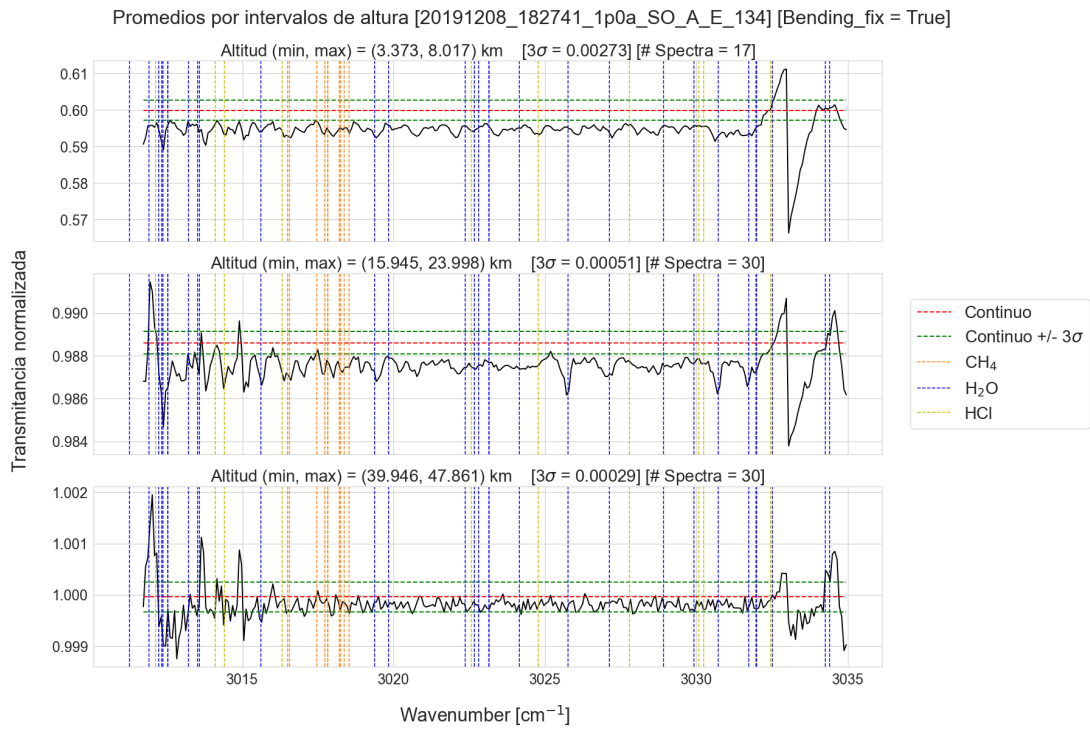


Figura 20: Efecto del filtrado de baja frecuencia mediante la transformada *wavelet* en los promedios del *scan* 8: 20191208\_182741.

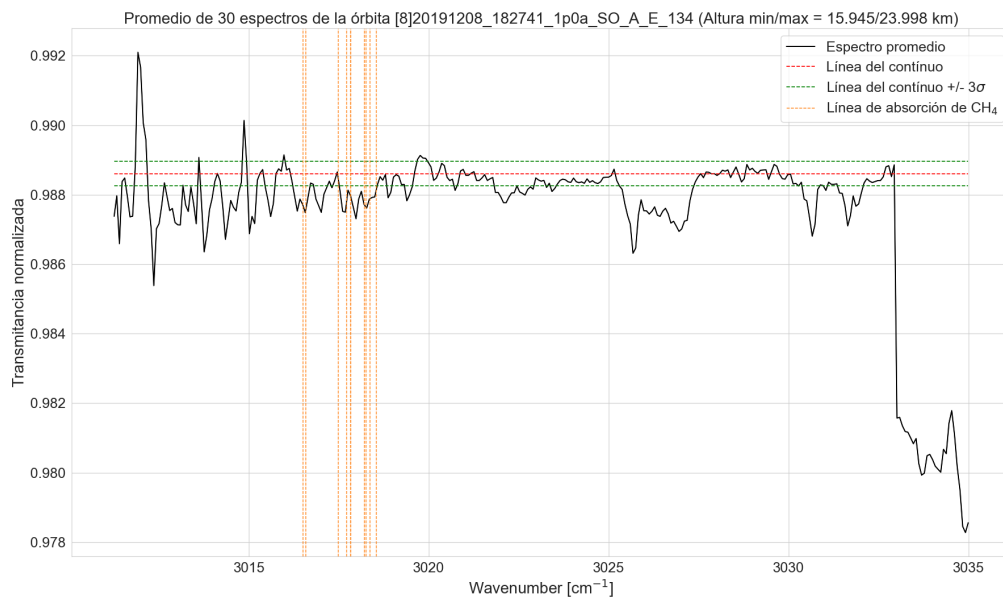


Figura 21: Promedio del *scan* 8: 20191208\_182741 en el intervalo de altura entre 16 y 24 km.

2.2.1.5. Scan 9: 20190716\_001551 (Hemisferio sur, temporada de afelio)

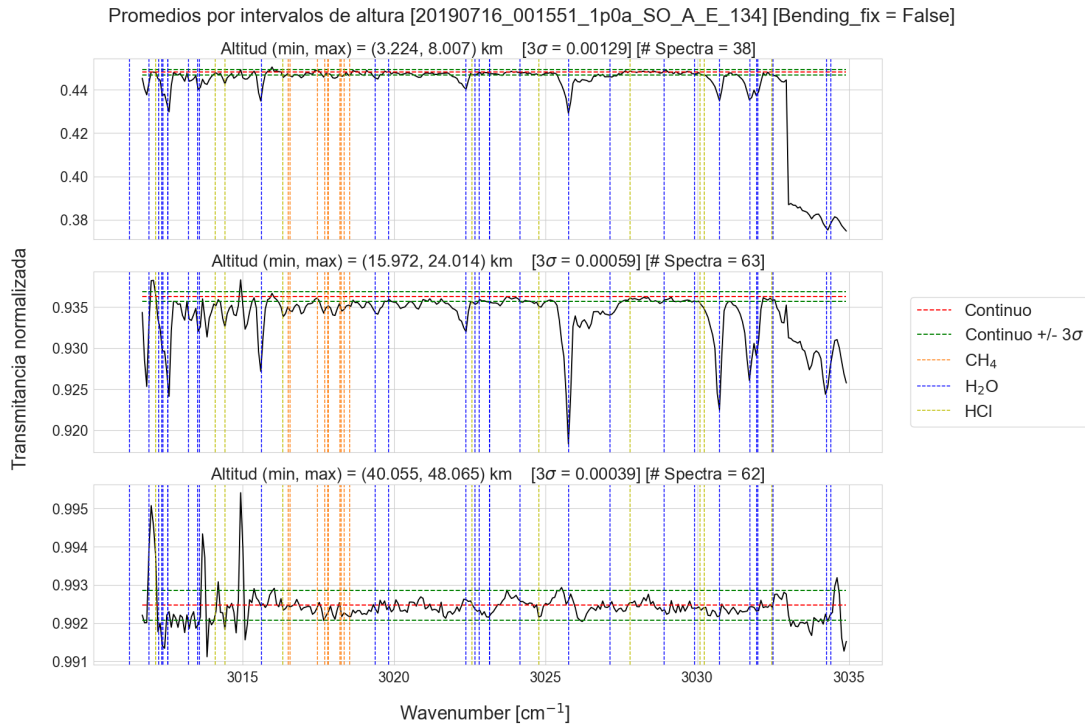


Figura 22: Promedios del scan 9: 20190716\_001551.

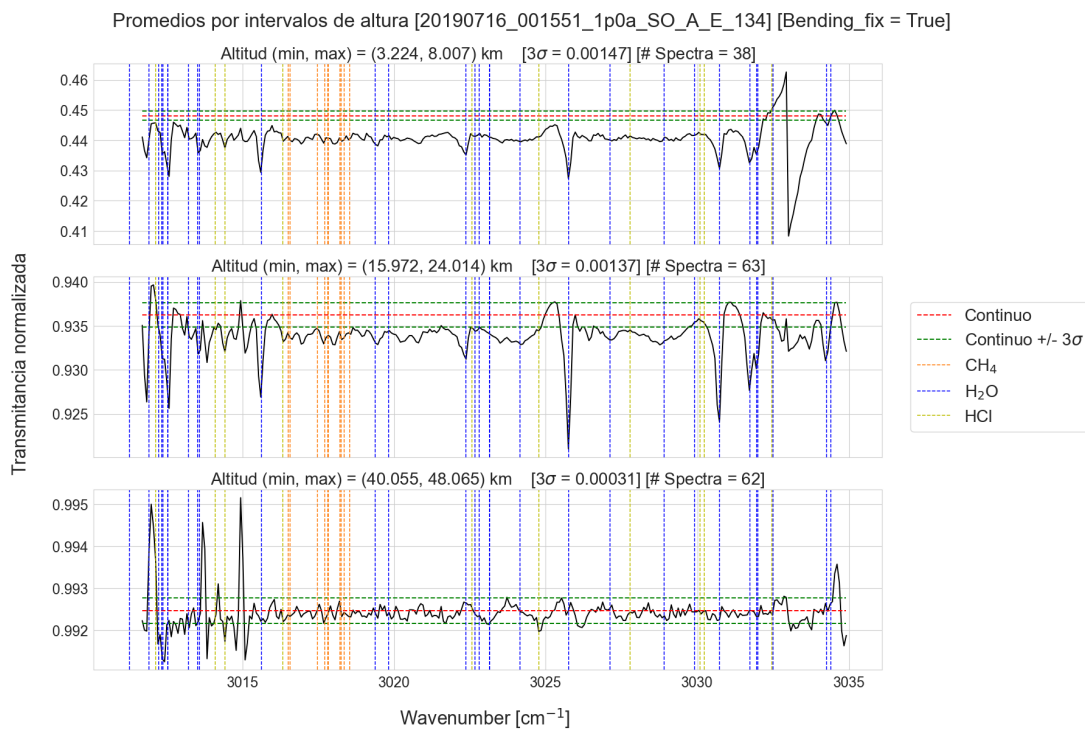


Figura 23: Efecto del filtrado de baja frecuencia mediante la transformada *wavelet* en los promedios del scan 9: 20190716\_001551.



## 2.2.2. Abundancia máxima de metano

Aunque no se observen claramente líneas de absorción del metano en los espectros promediados, esto no quiere decir que los espectros no nos puedan aportar información sobre este compuesto. De hecho, la transmitancia en las frecuencias donde se espera observar metano proporcionan una cota superior de la abundancia máxima en la atmósfera para este gas. A continuación, se presentan los resultados del cálculo de los límites máximos de abundancia de metano obtenidos en todos los *scans* seleccionados, utilizando el método descrito en la sección 2.1.3.2. Para obtener resultados más coherentes y facilitar su discusión, realicé promedios con ventanas de altura de  $(15\pm 5)$ ,  $(25\pm 5)$  y  $(35\pm 5)$  km (véase la subsección 2.3.3).

<i>Scan</i>	Upper limit (ppbv)		
	(10-20) km	(20-30) km	(30-40) km
[1]20200828_205430_1p0a_SO_A_E_134	0.0183	0.0083	0.0039
[2]20181030_074553_1p0a_SO_A_I_134	0.0225	0.0392	0.0212
[3]20200831_000045_1p0a_SO_A_E_134	0.0067	0.0045	0.0035
[4]20181030_062854_1p0a_SO_A_E_134	0.0268	0.0143	0.0075
[5]20180610_085321_1p0a_SO_A_I_134	0.0104	0.0076	0.0058
[6]20200813_211146_1p0a_SO_A_E_134	0.0055	0.0048	0.0035
[7]20191122_182701_1p0a_SO_A_I_134	0.0082	0.0037	0.0029
[8]20191208_182741_1p0a_SO_A_E_134	0.0051	<b>0.0022</b>	0.0023
[9]20190716_001551_1p0a_SO_A_E_134	0.0062	0.0037	0.0032

Tabla 2: Límites máximos de abundancia de metano correspondientes a los *scans* seleccionados.



## 2.3. Discusión de los resultados

### 2.3.1. Relación entre la opacidad atmosférica y la desviación estándar del promedio

Es bien conocido que la desviación estándar ( $\sigma$ ) de un espectro puede ofrecer información sobre la magnitud del error de medición (SNR), ya sea debido a factores instrumentales o a la variabilidad real de la atmósfera. Por consiguiente, la desviación estándar también puede servir como un indicador de la calidad de los promedios generados a partir de un *scan*.

Consideremos el *scan* 8 en la Tabla 1, en cuyo perfil de opacidad se observa una presencia mínima de aerosoles (véase Figura 2.13: panel A). Como se ha mencionado anteriormente, la desviación estándar se calcula en la región espectral entre 3027.7 y 3029.7  $\text{cm}^{-1}$ . Al excluir los dos primeros promedios, que corresponden a espectros ubicados por debajo de aproximadamente 16 km donde se encuentra la capa principal de aerosoles y, por lo tanto, son más propensos al ruido, se observa lo siguiente: al tomar la media de los valores de  $\sigma$  y compararlos con el valor promedio de desviación estándar correspondiente a un espectro individual ( $\approx 0.0005$ )<sup>10</sup>, se obtiene una reducción en un factor 5. Teóricamente, el efecto estadístico del promedio implica un factor de reducción del "error in the mean" proporcional a  $\sqrt{N}$ , donde  $N$  es el número de espectros promediados. En el caso del *scan* considerado, con un promedio de 30 espectros por intervalo de alturas, la reducción de  $\sigma$ , con un valor medio de  $\sigma \approx 0.00010$ , es consistente con lo esperado, es decir, de un factor 5.

Tomemos ahora el caso de los *scans* 6 y 1, cuyos perfiles de opacidad muestran una presencia más significativa de aerosoles en comparación con el *scan* 8 (véase Figura 2.13: paneles B y C). Al realizar el mismo procedimiento para obtener la desviación estándar promedio, se obtiene un factor de reducción de 3.2 ( $\sigma \approx 0.00015$ ) para el *scan* 6 y de 2.9 ( $\sigma \approx 0.00017$ ) para el *scan* 1. Comparando los resultados para las tres órbitas, se puede interpretar que condiciones atmosféricas, dependientes de la latitud o de la estación del año marciano juegan un papel

<sup>10</sup>Este valor representa la media de las desviaciones estándar de los espectros individuales de todos los *scans* seleccionados. Por consistencia, todas las desviaciones estándar han sido calculadas en la región espectral (3027.7 - 3029.7)  $\text{cm}^{-1}$

determinante en la cantidad y distribución de los aerosoles, por lo que también pueden afectar a la dispersión de la señal espectral, y con ello la del promedio correspondiente. En estos dos últimos casos, es posible que el peor resultado del factor de reducción esté relacionado con el efecto distorsionador causado por una mayor abundancia de aerosoles.

En el caso de sólo tener en cuenta que el error de medida en los espectros es puramente instrumental, la dispersión espectral individual no debería estar relacionada directamente con las condiciones atmosféricas, pero sí la propia operación del promediado: los dos últimos resultados podrían estar parcialmente causados por cómo el gradiente de opacidad atmosférica por altura interfiere en la determinación del continuo de transmisión por parte del *Pre-Processing*. Como ya se ha mencionado, la importancia de alinear los espectros a un valor específico previo promediado es significativa, especialmente cuando se trata de buscar absorciones tan bajas. En alturas tangentes con un mayor gradiente de opacidad/aerosoles, el continuo de los respectivos espectros es calculado con peor resultado (véase Figura 2.9). Esto conduce a que los espectros correspondiente a tales alturas no se normalicen con el grado de precisión necesario para el caso en cuestión, resultando en un promedio con una dispersión mayor de la esperada.

Asimismo conviene indicar que, en cualquier caso, la región en la cual se determina la desviación estándar no está completamente libre de líneas de absorción, con lo que no está reflejando el verdadero ruido asociado al espectro, pero sí es la menos afectada por las mismas.

### 2.3.2. Sobre el promedio del *scan 8* entre 16 y 24 km

Se ha incluido una figura adicional (véase Figura 2.22) en el conjunto de figuras relacionadas con la órbita 8. Esta figura muestra exclusivamente el promedio de los espectros obtenidos en el rango de alturas de 16 a 24 km. El propósito de incluir esta figura es destacar la posible detección, con una confianza  $3\text{-}\sigma$ , de algunos picos de absorción de metano. Específicamente, se observan picos en la línea de absorción a  $3016.5\text{ cm}^{-1}$  y en cuatro ubicados entre  $3018.2$  y  $3018.5\text{ cm}^{-1}$ . Sin embargo, es importante ser cauteloso al interpretar estos resultados por varios motivos:

1. En primer lugar, es importante destacar que la simulación realizada por KOPRA indica que la línea de absorción más intensa de metano en el orden 134 se encuentra en  $3017.7$

$\text{cm}^{-1}$ . Sin embargo, al examinar la figura proporcionada, no se observa un indicio claro de la presencia de un pico de absorción en esa frecuencia. Esto sugiere que dicha línea de absorción puede no estar presente o ser muy débil en los datos analizados.

2. También es importante tener en cuenta que se están analizando picos con valores de absorción en el rango de las milésimas, lo cual los hace más susceptibles a ser afectados por artefactos ajenos al metano, ya sean de origen atmosférico o instrumental. Estos artefactos pueden introducir perturbaciones en los datos y complicar la evaluación precisa de los resultados. Por lo tanto, es necesario ser cautelosos al analizar estos picos y considerar cuidadosamente la posible influencia de otros factores en los resultados obtenidos.
3. Aunque los picos mencionados se encuentren dentro de un margen de confianza de  $3\text{-}\sigma$ , es importante destacar que siguen estando muy cerca del límite de detección del instrumento. Además, existe la posibilidad de que se produzcan superposiciones con otras características espectrales o que las señales sean demasiado sutiles para ser detectadas de manera clara.
4. Una característica relevante del filtro AOTF utilizado por NOMAD, que aún no se ha mencionado, es la posibilidad de contaminación entre órdenes de difracción adyacentes. En este sentido, es importante considerar que algunos de los picos observados podrían ser resultado de este efecto y, por lo tanto, no ser reales en sí mismos. La superposición de señales entre órdenes adyacentes puede generar interferencias y distorsiones en el espectro, lo que dificulta la correcta interpretación de los datos. Es esencial tener en cuenta esta posible contaminación al analizar y evaluar los resultados, y buscar métodos adicionales de verificación y validación para confirmar la autenticidad de los picos observados.

Una vez aclaradas estas precauciones, es importante tener en cuenta un factor que puede tener un impacto significativo en estos resultados, especialmente debido a las bajas absorciones involucradas: la resolución espectral limitada de NOMAD. Esto implica que algunas de las líneas de absorción mencionadas pueden estar ubicadas en regiones donde no se cuenta con datos de transmisión cercanos. La falta de una mayor resolución puede llevar a una mayor incertidumbre en la identificación y cuantificación precisa de estas líneas de absorción débi-

les. Por lo tanto, es fundamental tener en cuenta esta limitación en la interpretación de los resultados.

### 2.3.3. Corrección del *bending* residual

Para comprobar el efecto que ha tenido la eliminación de la baja frecuencia de los espectros mediante la transformada *wavelet*, consideremos el caso del *scan* 8. Los promedios de esta órbita, sea por motivos atmosféricos o instrumentales, indican un cantidad de absorción mucho menor que en el resto. Quizás sea ésta la razón por la que es más apreciable la pequeña oscilación de la señal, especialmente desde los 24 hasta los 48 km de altitud. Esta oscilación no tiene por qué estar compuesta totalmente por la debida al ajuste polinómico imperfecto de la curvatura instrumental que hace el *Pre-Processing*. Varias bandas de absorción coinciden con los valles de dicha oscilación, y el método en cuestión sustrae igualmente la componente de baja frecuencia asociada a estas zonas. Por tanto, en el caso de espectros a alturas bajas, donde líneas de absorción fuertes pueden introducir curvaturas en los espectros, difíciles de separar de curvaturas residuales de la calibración, la aplicación de este método debe hacerse con gran cautela. Mi recomendación es realizar un estudio previo de la curvatura presente en las simulaciones con KOPRA (sin efectos de *bending* instrumental). Ese análisis no ha sido llevado a cabo en este trabajo ya que, al ser la corrección del *bending* un objetivo secundario, no se llegó a profundizar más en el método en este sentido.

Igualmente, se puede valorar el efecto beneficioso que puede aportar el método elaborado para corregir la curvatura residual de los promedios. Aunque esta corrección afecte a zonas probablemente relacionadas con las bandas de absorción, el uso de la transformada *wavelet* permite que se preserve de manera casi intacta la forma de los picos de absorción individuales. Esto conlleva a que no se pierda una parte importante de la información del espectro, y da lugar a una mejor visualización de lo que podrían ser picos que previamente no se apreciaban tanto. Los picos de absorción que realmente podrían beneficiarse de esto son aquellos encontrados en las zonas en las que el espectro asciende o desciende debido a la curvatura residual.

### 2.3.4. Abundancia máxima de metano

Después de aplicar a todas las órbitas la derivación aproximada de la abundancia máxima de metano a partir del dato de Knutsen et al. (2021)[36] (véase la Figura 2.10), se obtuvo un valor mínimo de 0.0022 ppbv. Este valor proviene de un promedio (de 37 espectros) del *scan* 8 calculado en un intervalo de  $(25\pm 5)$  km. El hecho de que se trate del valor más bajo de abundancia máxima concuerda con que dicha órbita cuente con el perfil de opacidad menos afectado por los aerosoles. Como se ha descrito anteriormente, en el caso en el que el valor transmisión del espectro, correspondiente a la frecuencia de  $3017.68\text{ cm}^{-111}$ , fuese mayor que el valor su continuo menos la dispersión del espectro, el valor del límite máximo se toma como  $1-\sigma$ . Este fue el caso para todos los *scans* analizados.

Para comparar el valor de abundancia máxima obtenido con el determinado por Knutsen et al. (2021) para un espectro individual (0.061 ppbv), ha sido necesario considerar el doble del valor que he obtenido en este estudio. Esto es así debido a que Knutsen y su equipo definieron su límite máximo de metano con una incertidumbre de  $2-\sigma$ . Una vez tenido esto en cuenta, el valor más bajo del límite máximo obtenido ha sido de 0.0044 ppbv, el cual, comparado con el límite superior encontrado por Knutsen et al. (2021), es un orden de magnitud menor. Sin embargo, para hacer una comparación más correcta de los resultados, también se aplicó toda la metodología seguida en el mismo *scan* en el que Knutsen et al. (2021) se basaron para estimar su límite máximo. Para dicha órbita, y también en base a un promedio determinado en un intervalo de  $(25\pm 5)$  km, la abundancia máxima más baja obtenida fue de 0.0062 ( $2-\sigma$ ). Esto supone un factor de mejora muy próximo a 10.

Otro estudio relevante para comparar los resultados es el realizado por F. Montmessin et al. (2021) [38], donde utilizaron los datos del instrumento ACS, que acompaña a NOMAD en el orbitador TGO. En este estudio, se informó de un límite máximo de 0.020 ppbv ( $2-\sigma$ ), un valor aún más bajo que el reportado por Knutsen et al. (2021) y el obtenido en este trabajo, principalmente debido a la mayor sensibilidad de ACS. Igualmente, la abundancia máxima de metano que se ha logrado con el promediado sigue siendo significativa, no sólo por reflejar

---

<sup>11</sup>Esta frecuencia es el más próximo al correspondiente a la línea más intensa de metano en el orden estudiado ( $3017.7\text{ cm}^{-1}$ )

una mejora en el contexto de NOMAD, sino también en el de ACS, al tratarse de un valor considerablemente próximo al mejor que se ha obtenido hasta la fecha.

En cuanto a la comprobación del beneficio que podría suponer la corrección de *bending* residual al valor de la abundancia, se ha comprobado lo siguiente: la modificación que provoca en algunas zonas el espectro como las bandas de absorción, tal y como se ha mencionado, altera consecuentemente el valor de abundancia. Si se llevara un control más preciso de la actuación del filtrado mediante la transformada *wavelet*, así como un estudio más profundo de las funciones *wavelets* más adecuadas según el caso, quizás sea posible llegar a encontrar una aplicación beneficiosa y confiable de este método en cuanto al cálculo de la abundancia máxima.

En el caso de las órbitas seleccionadas, y para la anchura de los intervalos de altura considerados, el número de espectros para promediar no es muy alto, lo que supone un factor limitante si se desea mejorar aún más el SNR, y con ello la minimización del límite máximo de abundancia de metano. En relación a esto, en este trabajo también se llevó a cabo la prueba de aumentar la anchura del intervalo de altura considerado: tomando el *scan* 8 por haber dado el mejor resultado, se calculó un promedio de los espectros contenidos entre 10 y 50 km, intervalo de alturas que contiene 150 espectros. La abundancia máxima  $2\text{-}\sigma$  obtenida a partir de éste fue de 0.0042 ppbv, un valor prácticamente igual al calculado para el promedio de 37 espectros. Esto evidencia una limitación previsible al promediar espectros. Los promedios deben realizarse en mediciones homogéneas. Tanto la variación en la abundancia de aerosoles con la altura, como la variabilidad en la temperatura y la densidad, que afecta a las líneas de  $\text{CO}_2$ , así como la variabilidad vertical en la abundancia de especies minoritarias como el  $\text{H}_2\text{O}$ , implican que los espectros observados en alturas muy distantes, típicamente más allá de una escala de altura (10 km), es posible que no contribuyan significativamente a la mejora del SNR lograda mediante el promediado. Es de esperar que los espectros dejen de ser homogéneos y este resultado sugiere esta posibilidad.

## 3 Conclusiones

En este trabajo se ha realizado un análisis de los datos de NOMAD con el objeto de mejorar su capacidad de detección de compuestos minoritarios mediante un promedio de espectros. Se ha realizado un código *Python*, que se ha implementado en el código de *Pre-Processing* del IAA/CSIC, y se ha aplicado a la búsqueda de metano atmosférico, en el orden de difracción 134 del canal SO de NOMAD. Esta labor tiene una dificultad notable, derivada de dos fuentes de incertidumbre importantes: la primera son los errores sistemáticos residuales en los datos calibrados de NOMAD, con bandeados o inclinaciones en los espectros a veces mucho mayores que los errores puramente aleatorios, y la segunda es la muy variable opacidad de los aerosoles de la atmósfera marciana, lo que conlleva incertidumbres en el continuo de cada espectro. Estas dos dificultades son la causa por la que tras 5 años de análisis de los datos, ningún grupo del consorcio de NOMAD había abordado este problema aún, ni se haya explotado científicamente la opción de promediar espectros de ocultación solar.

### 3.1. Resumen de los resultados obtenidos

En este trabajo se ha analizado el impacto de la desviación estándar en la calidad de los promedios de los espectros capturados por el instrumento NOMAD. En este trabajo se ha realizado una selección de nueve *scans* que cubren condiciones geofísicas (estación, latitud, cantidad de aerosoles atmosféricos) bien diversas. De todos ellos, el estudio se ha centrado en los tres *scans* con menor contaminación de aerosoles en la baja troposfera marciana (por debajo de 20 km). Después de promediar sus respectivos espectros (una media de 30) y comparar sus desviaciones estándar con la dispersión media de un único espectro, se ha obtenido que los *scans* con mayor presencia de aerosoles mostraron una reducción de la desviación estándar en un factor entre 2.9 y 3.2, mientras que en la órbita con una casi despreciable cantidad de

aerosoles se encontró un factor de reducción de 5. Este último valor concuerda con el factor de reducción, proporcional a  $\sqrt{N}$ , que se logra por medio del promediado. Dicha proporción se ve reducida en los promedios de los otros *scans*, lo que ha confirmado que la presencia de aerosoles en la atmósfera afecta la dispersión de la señal espectral, y por lo tanto a la calidad del promedio.

En cuanto a posibles detecciones positivas de metano, solo en uno de los *scans* (el número 8), uno de los promedios entre alturas de 16-24 km encontró unas líneas de absorción en posiciones espectrales coincidentes con líneas de metano, concretamente en  $3016.5 \text{ cm}^{-1}$  y entre  $3018.2$  y  $3018.5 \text{ cm}^{-1}$ , con una confianza de  $3\text{-}\sigma$ . Sin embargo no se observa absorción en la línea mas intensa de metano en esta región espectral, en  $3017.7 \text{ cm}^{-1}$ , por lo que las líneas encontradas seguramente corresponden a absorciones de líneas débiles de  $\text{H}_2\text{O}$  en órdenes de difracción contiguos. Sin embargo, es necesario tener precauciones al interpretar estos resultados debido a varios factores: la falta de un indicio claro de la línea de absorción más intensa según la simulación de KOPRA, la susceptibilidad de los picos a artefactos y perturbaciones externas, la proximidad al límite de detección del instrumento y la posibilidad de contaminación entre órdenes de difracción adyacentes. Además, la resolución espectral limitada de NOMAD puede afectar la identificación precisa de las líneas de absorción. Por lo tanto, se debe considerar cuidadosamente estos factores al interpretar los resultados.

A falta de una identificación clara de los picos de absorción de metano, se ha estimado la abundancia máxima de este gas utilizando los espectros promediados y se ha comparado con un estudio previo (E.W. Knutsen et al, 2021[36]). Se ha comprobado que el promediado mejora el límite máximo de abundancia de metano en un factor entre 10 y 14 en comparación con los resultados anteriores. También se ha sugerido que una versión mejorada de la corrección del *bending* residual, además del aumento en el número de espectros promediados, podrían contribuir a una mejora en la estimación de la abundancia máxima.

Se ha discutido el efecto del *bending* residual en los espectros y se ha propuesto un método de corrección utilizando la transformada *wavelet*. Se ha encontrado que esta corrección preserva la forma de los picos de absorción individuales, lo que mejora la visualización de los mismos, especialmente a aquellos situados en las regiones en las que aparece la curvatura



residual.

Se ha observado un *bending* residual en los espectros limpios, tras el *Pre-Processing*, y se ha propuesto un método de corrección del mismo mediante una transformada *wavelet*. Se ha encontrado que esta corrección no representa una mejora significativa de la habilidad de detección de líneas que seguimos en este trabajo, salvo en algunos casos en los que los espectros presentan curvatura real (por absorción real de líneas cercanas). En estos casos, aunque la transformación *wavelet* perturba absorciones reales, se podrían conseguir detecciones algo mejoradas. Concluimos que este tipo de corrección necesita un estudio propio con muchos mas casos que los nueve *scans* utilizados en este trabajo.

En este estudio, se ha demostrado que el promediado de espectros es una estrategia fundamental para reducir la dispersión y mejorar la calidad de los datos adquiridos con el instrumento NOMAD. A través de esta técnica, se ha logrado aumentar significativamente el SNR, lo que ha revelado un gran potencial para mejorar la detección de picos de absorción y reducir el límite máximo de abundancia de metano que se puede detectar con precisión.

Como se ha comentado mas arriba, la técnica del promediado es una novedad en el equipo científico del instrumento NOMAD, el cual está compuesto por más de una docena de grupos de investigación de 7 países[39]. Hasta la fecha, nadie había aplicado esta técnica debido a la dificultad de calcular y separar con precisión el continuo de absorción de los aerosoles de las contribuciones de otros gases en los datos, además de lidiar con la presencia de la mencionada curvatura instrumental que éstos presentan. La estrategia de corrección del *bending* que se sigue en el IAA/CSIC ha sido muy conveniente para la aplicación efectiva de estos promedios, y a su vez, este trabajo expande las posibilidades de dicha herramienta, y en general, pensamos que supone una aportación importante a la explotación científica de los datos de NOMAD.

## 3.2. Aplicaciones y difusión

Se han llevado a cabo varias acciones para difundir y aplicar los resultados obtenidos en este estudio:

1. **Implementación del código en el *Pre-Processing* del IAA:** se ha procedido a implementar el código desarrollado en este estudio en el código del *Pre-processing* del Instituto de Astrofísica de Andalucía (IAA). Esto significa que el código se ha integrado en el flujo de trabajo y las herramientas utilizadas por el IAA para el procesamiento y análisis de datos relacionados con el instrumento NOMAD. Esta implementación permitirá aplicar la técnica de promediado de espectros en futuras investigaciones y estudios llevados a cabo por el IAA.
2. **Presentación de póster en el congreso CPESS-7[40]:** se ha realizado un póster que será presentado en el congreso CPESS-7 (Ciencias Planetarias y Exploración del Sistema Solar), donde se mostrarán las conclusiones más relevantes de la investigación. Este congreso es un evento importante en el campo de la ciencia planetaria y ha proporcionado una oportunidad para compartir los resultados obtenidos con la comunidad científica.
3. **Aplicación a HCl:**
  - Extensión en marcha de TFM reciente: Recientemente se ha completado un TFM en la Universidad de Granada donde se han analizado datos de NOMAD para buscar líneas de HCl[41]. El trabajo, realizado en el IAA, encontró abundancias de HCl en la época del perihelio marciano, un resultado compatible con el de otros equipos antes. Una extensión reciente de dicho trabajo para cubrir 3 años marcianos completos ha revelado muchas detecciones ambiguas, en el límite de detección, por lo que se está realizando una revisión de estos casos dudosos utilizando promedios de datos, con el código desarrollado en este trabajo. (cloruro de hidrógeno). Esto implica utilizar la metodología y el código desarrollado en este estudio para analizar datos relacionados con la presencia y distribución de HCl en la atmósfera.
    - Resultados preliminares en Póster sobre HCl en CPESS-7: está planificada la presentación de resultados preliminares sobre los avances en la detección y caracterización de HCl en un póster en el congreso CPESS-7.
    - Publicación en revista: se tiene prevista la publicación de los resultados completos y detallados sobre el HCl en una revista especializada en el campo.

#### 4. Aplicación a la búsqueda de gases traza de nitrógeno y de azufre:

- 2 TFM en marcha en la UGR dirigidos desde el IAA: se están llevando a cabo dos TFM en la Universidad de Granada (UGR) bajo la supervisión del IAA. En estos trabajos, se ha planteado aplicar la técnica de promediado de espectros para buscar líneas débiles de compuestos de nitrógeno y de azufre como  $\text{NO}_2$  y OCS en diversos órdenes de difracción de NOMAD, especies no encontradas aún en la atmósfera marciana. Esta aplicación podría ampliar el alcance de la investigación y mejorar el conocimiento de la distribución de estos compuestos en Marte.
- Publicación prevista en revista internacional con árbitro: se planea publicar los resultados obtenidos en las investigaciones de los TFM mencionados anteriormente en una revista internacional con revisión por pares.

# Bibliografía

- [1] NASA - mars fact sheet. <https://nssdc.gsfc.nasa.gov/planetary/factsheet/marsfact.html>. 22 de mayo de 2023.
- [2] Centro de Astrobiología (CSIC-INTA). Mars atmosphere. <http://cab.inta-csic.es/remo/en/mars-atmosphere/>, (s.f.).
- [3] European Space Agency. Facts about Mars. [https://www.esa.int/Science\\_Exploration/Space\\_Science/Mars\\_Express/Facts\\_about\\_Mars](https://www.esa.int/Science_Exploration/Space_Science/Mars_Express/Facts_about_Mars), (s.f.).
- [4] B. M. Jakosky and R. J. Phillips. Mars' volatile and climate history. *Nature*, 412:237–244, 2001.
- [5] B. M. Jakosky et al. Loss of the Martian atmosphere to space: Present-day loss rates determined from MAVEN observations and integrated loss through time. *Icarus*, 315:146–157, 2018.
- [6] David C. Catling and James F. Kasting. *Atmospheric Evolution on Inhabited and Lifeless Worlds*. Cambridge University Press, 2017.
- [7] Vladimir A. Krasnopolsky and Timothy E. Hewagama. Detection of methane in the martian atmosphere: evidence for life? *Icarus*, 172(2):537–547, 2004.
- [8] V. Formisano, S. Atreya, T. Encrenaz, N. Ignatiev, and M. Giuranna. Detection of methane in the atmosphere of Mars. *Science*, 306(5702):1758–1761, 2004.
- [9] Michael J. Mumma, Geronimo L. Villanueva, Robert E. Novak, Tilak Hewagama, Boncho P. Boney, Michael A. DiSanti, Avi M. Mandell, and Michael D. Smith. Strong Release of Methane on Mars in Northern Summer 2003. *Science*, 323(5917):1041, February 2009.
- [10] G. L. Villanueva, M. J. Mumma, R. E. Novak, H. U. Käufl, P. Hartogh, T. Encrenaz, A. T. Tokunaga, A. Khayat, and M. D. Smith. A sensitive search for organics (CH<sub>4</sub>, CH<sub>3</sub>OH,

- H<sub>2</sub>CO, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>), hydroperoxyl (HO<sub>2</sub>), nitrogen compounds (N<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, HCN) and chlorine species (HCl, CH<sub>3</sub>Cl) on Mars using ground-based high-resolution infrared spectroscopy. *Icarus*, 223(1):11–27, 2013.
- [11] Christopher R. Webster, Paul R. Mahaffy, Sushil K. Atreya, Gregory J. Flesch, Michael A. Mischna, Pierre-Yves Meslin, Kenneth A. Farley, Pamela G. Conrad, Lance E. Christensen, Alexander A. Pavlov, F. Javier Martín-Torres, María-Paz Zorzano, Timothy H. McConnochie, Tobias Owen, Jennifer L. Eigenbrode, Daniel P. Glavin, Andrew Steele, Charles A. Malespin, P. Douglas Archer, Brad Sutter, Patrice Coll, Caroline Freissinet, Christopher P. McKay, Susanne P. Schwenzer, John C. Bridges, Rafael Navarro-Gonzalez, Ralf Gellert, Mark T. Lemmon, and MSL Science Team. Methane on Mars: A review. *Science*, 342(6156):263–266, 2013.
- [12] John P. Grotzinger, Joy Crisp, Ashwin R. Vasavada, Robert C. Anderson, Charles J. Baker, Robert Barry, David F. Blake, Pamela Conrad, Kenneth S. Edgett, Bobak Ferdowski, Ralf Gellert, John B. Gilbert, Matt Golombek, Javier Gómez-Elvira, Donald M. Hassler, Louise Jandura, Maxim Litvak, Paul Mahaffy, Justin Maki, Michael Meyer, Michael C. Malin, Igor Mitrofanov, John J. Simmonds, David Vaniman, Richard V. Welch, and Roger C. Wiens. Mars Science Laboratory Mission and Science Investigation. , 170(1-4):5–56, September 2012.
- [13] Christopher R. Webster, Paul R. Mahaffy, Sushil K. Atreya, Gregory J. Flesch, Michael A. Mischna, Pierre-Yves Meslin, Kenneth A. Farley, Pamela G. Conrad, Lance E. Christensen, Alexander A. Pavlov, F. Javier Martín-Torres, María-Paz Zorzano, Timothy H. McConnochie, Tobias Owen, Jennifer L. Eigenbrode, Daniel P. Glavin, Andrew Steele, Charles A. Malespin, P. Douglas Archer, Brad Sutter, Patrice Coll, Caroline Freissinet, Christopher P. McKay, Susanne P. Schwenzer, John C. Bridges, Rafael Navarro-Gonzalez, Ralf Gellert, Mark T. Lemmon, and MSL Science Team. Mars methane detection and variability at Gale crater. *Science*, 347(6220):415–417, 2015.
- [14] Christopher R. Webster, Paul R. Mahaffy, Sushil K. Atreya, John E. Moores, Gregory J. Flesch, Charles Malespin, Christopher P. McKay, German Martinez, Christina L. Smith,

- Javier Martin-Torres, Javier Gomez-Elvira, Maria-Paz Zorzano, Michael H. Wong, Melissa G. Trainer, Andrew Steele, Doug Archer, Brad Sutter, Patrice J. Coll, Caroline Freissinet, Pierre-Yves Meslin, Raina V. Gough, Christopher H. House, Alexander Pavlov, Jennifer L. Eigenbrode, Daniel P. Glavin, John C. Pearson, Didier Keymeulen, Lance E. Christensen, Susanne P. Schwenzer, Rafael Navarro-Gonzalez, Jorge Pla-García, Scot C. R. Rafkin, Álvaro Vicente-Retortillo, Henrik Kahanpää, Daniel Viudez-Moreiras, Michael D. Smith, Ari-Matti Harri, Maria Genzer, Donald M. Hassler, Mark Lemmon, Joy Crisp, Stanley P. Sander, Richard W. Zurek, and Ashwin R. Vasavada. Background levels of methane in Mars' atmosphere show strong seasonal variations. *Science*, 360(6393):1093–1096, June 2018.
- [15] A. C. Vandaele, J. J. Lopez-Moreno, M. R. Patel, G. Bellucci, F. Daerden, B. Ristic, S. Robert, I. R. Thomas, V. Wilquet, M. Allen, G. Alonso-Rodrigo, F. Altieri, S. Aoki, D. Bolsée, T. Clancy, E. Cloutis, C. Depiesse, R. Drummond, A. Fedorova, V. Formisano, B. Funke, F. González-Galindo, A. Geminala, J. C. Gérard, M. Giuranna, L. Hetey, N. Ignatiev, J. Kaminski, O. Karatekin, Y. Kasaba, M. Leese, F. Lefèvre, S. R. Lewis, M. López-Puertas, M. López-Valverde, A. Mahieux, J. Mason, J. McConnell, M. Mumma, L. Neary, E. Neefs, E. Renotte, J. Rodriguez-Gomez, G. Sindoni, M. Smith, A. Stiepen, A. Trokhimovsky, J. Vander Auwera, G. Villanueva, S. Viscardy, J. Whiteway, Y. Willame, and M. Wolff. NOMAD, an Integrated Suite of Three Spectrometers for the ExoMars Trace Gas Mission: Technical Description, Science Objectives and Expected Performance. , 214(5):80, August 2018.
- [16] European Space Agency. First results from the ExoMars Trace Gas Orbiter. [https://www.esa.int/Science\\_Exploration/Human\\_and\\_Robotic\\_Exploration/Exploration/ExoMars/First\\_results\\_from\\_the\\_ExoMars\\_Trace\\_Gas\\_Orbiter](https://www.esa.int/Science_Exploration/Human_and_Robotic_Exploration/Exploration/ExoMars/First_results_from_the_ExoMars_Trace_Gas_Orbiter), 10 de abril de 2019.
- [17] M. Saunio, A. R. Stavert, B. Poulter, P. Bousquet, J. G. Canadell, R. B. Jackson, P. A. Raymond, E. J. Dlugokencky, S. Houweling, P. K. Patra, P. Ciais, V. K. Arora, D. Bastviken, P. Bergamaschi, D. R. Blake, G. Brailsford, L. Bruhwiler, K. M. Carlson, M. Carrol,

- S. Castaldi, N. Chandra, C. Crevoisier, P. M. Crill, K. Covey, C. L. Curry, G. Etiope, C. Frankenberg, N. Gedney, M. I. Hegglin, L. Höglund-Isaksson, G. Hugelius, M. Ishizawa, A. Ito, G. Janssens-Maenhout, K. M. Jensen, F. Joos, T. Kleinen, P. B. Krummel, R. L. Langenfelds, G. G. Laruelle, L. Liu, T. Machida, S. Maksyutov, K. C. McDonald, J. McNorton, P. A. Miller, J. R. Melton, I. Morino, J. Müller, F. Murguia-Flores, V. Naik, Y. Niwa, S. Noce, S. O'Doherty, R. J. Parker, C. Peng, S. Peng, G. P. Peters, C. Prigent, R. Prinn, M. Ramonet, P. Regnier, W. J. Riley, J. A. Rosentreter, A. Segers, I. J. Simpson, H. Shi, S. J. Smith, L. P. Steele, B. F. Thornton, H. Tian, Y. Tohjima, F. N. Tubiello, A. Tsuruta, N. Viovy, A. Voulgarakis, T. S. Weber, M. van Weele, G. R. van der Werf, R. F. Weiss, D. Worthy, D. Wunch, Y. Yin, Y. Yoshida, W. Zhang, Z. Zhang, Y. Zhao, B. Zheng, Q. Zhu, Q. Zhu, and Q. Zhuang. The global methane budget 2000–2017. *Earth System Science Data*, 12(3):1561–1623, 2020.
- [18] Judith A. Rosentreter, Alberto V. Borges, Bridget R. Deemer, Meredith A. Holgerson, Shaoda Liu, Chunlin Song, John Melack, Peter A. Raymond, Carlos M. Duarte, George H. Allen, David Olefeldt, Benjamin Poulter, Tom I. Battin, and Bradley D. Eyre. Half of global methane emissions come from highly variable aquatic ecosystem sources. *Nature Geoscience*, 14(4):225–230, 2021.
- [19] G. Etiope and B. Sherwood Lollar. Abiotic Methane on Earth. *Reviews of Geophysics*, 51:276–299, 2013.
- [20] D. Oehler and G. Etiope. Methane seepage on mars: where to look and why. *Astrobiology*, 17:1233–1264, 2017.
- [21] O. Korablev et al. No detection of methane on Mars from early ExoMars Trace Gas Orbiter observations. *Nature*, 568:517–520, 2019.
- [22] European Space Agency. Trace Gas Orbiter. <https://exploration.esa.int/web/mars/-/46475-trace-gas-orbiter>, 12 de marzo de 2020.
- [23] H. Svedhem, J. L. Vago, P. Mitschdörfer, R. de Groot, M. Montagna, and P.-Y. Renaud. The ExoMars Trace Gas Orbiter. *Space Sci. Rev.*, 215(In press), 2019.

- [24] Peter Bernath. Solar occultation. [http://www.ace.uwaterloo.ca/solar\\_occultation.php](http://www.ace.uwaterloo.ca/solar_occultation.php). s.f.
- [25] A C Vandaele, E Neefs, R Drummond, I R Thomas, F Daerden, J.-J. Lopez-Moreno, J Rodriguez, M R Patel, G Bellucci, M Allen, F Altieri, D Bolsée, T Clancy, S Delanoye, C Depiesse, E Cloutis, A Fedorova, V Formisano, B Funke, D Fussen, A Geminale, J.-C. Gérard, M Giuranna, N Ignatiev, J Kaminski, O Karatekin, F Lefèvre, M López-Puertas, M López-Valverde, A Mahieux, J McConnell, M Mumma, L Neary, E Renotte, B Ristic, S Robert, M Smith, S Trokhimovsky, J Vander Auwera, G Villanueva, J Whiteway, V Wilquet, and M Wolff. Science objectives and performances of NOMAD, a spectrometer suite for the ExoMars TGO mission. *Planetary and Space Science*, 119:233–249, 2015.
- [26] Dennis Nevejans, E. Neefs, Emiel Ransbeeck, Sophie Berkenbosch, Roland Clairquin, Lieve Vos, Wouter Moelans, Stijn Glorieux, Ann Baeke, O. Korablev, Imant Vinogradov, Yuri Kalinnikov, Benny Bach, Jean-Pierre Dubois, and Eric Villard. Compact high-resolution spaceborne echelle grating spectrometer with acousto-optical tunable filter based order sorting for the infrared domain from 2.2 to 4.3 $\mu$ m. *Applied optics*, 45:5191–206, 08 2006.
- [27] Ian R Thomas, Shohei Aoki, Loïc Trompet, Séverine Robert, Cédric Depiesse, Yannick Willame, Justin T Erwin, Ann Carine Vandaele, Frank Daerden, Arnaud Mahieux, Eddy Neefs, Bojan Ristic, Laszlo Hetey, Sophie Berkenbosch, Roland Clairquin, Bram Beekman, Manish R Patel, Jose Juan Lopez-Moreno, and Giancarlo Bellucci. Calibration of NOMAD on ESA's ExoMars Trace Gas Orbiter: Part 1 – The Solar Occultation channel. *Planetary and Space Science*, 218:105411, 2022.
- [28] IMK-ASF - institute of meteorology and climate research, atmospheric trace gases and remote sensing. <https://www.imk-asf.kit.edu/english/312.php>. (s.f).
- [29] HITRAN - High-Resolution Transmission Molecular Absorption Database. <https://hitran.org>. Mayo de 2023.
- [30] M.A. Lopez-Valverde, B. Funke, A. Brines, A. Stolzenbach, A. Modak, B. Hill, F. Gonzalez-Galindo, I. Thomas, L. Trompet, S. Aoki, G. Villanueva, G. Liuzzi, J. Erwin, U. Grabowski,



- F. Forget, J.J. Lopez-Moreno, J. Rodriguez-Gomez, B. Ristic, F. Daerden, and ... the NOMAD team. Martian atmospheric temperature and density profiles during the 1st year of NOMAD/TGO solar occultation measurements. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 127, 2023.
- [31] Yannick Willame, Cédric Depiesse, Jonathon P. Mason, Ian R. Thomas, Manish R. Patel, Brijen Hathi, Mark R. Leese, David Bolsée, Michael J. Wolff, Loïc Trompet, Ann Carine Vandaele, Arianna Piccialli, Shohei Aoki, Bojan Ristic, Eddy Neefs, Bram Beeckman, Sophie Berkenbosch, Roland Clairquin, Arnaud Mahieux, Nuno Pereira, Séverine Robert, Sébastien Viscardy, Valérie Wilquet, Frank Daerden, José Juan Lopez-Moreno, and Giancarlo Bellucci. Calibration of the NOMAD-UVIS data. , 218:105504, September 2022.
- [32] Gregory R. Lee and Ralf Gommers and Filip Waselewski and Kai Wohlfahrt and Aaron O’Leary. PyWavelets: A Python package for wavelet analysis. *Journal of Open Source Software*, 4(36):1237, 2019.
- [33] G. Strang and T. Nguyen. *Wavelets and Filter Banks*. Wellesley-Cambridge Press, 1996.
- [34] Wavelets.pybytes.com - biorthogonal 3.9 wavelet. <https://wavelets.pybytes.com/wavelet/bior3.9/>. s.f.
- [35] Mallat Stéphane. Chapter 7 - wavelet bases. In *A Wavelet Tour of Signal Processing (Third Edition)*, pages 263–376. Academic Press, Boston, third edition edition, 2009.
- [36] Elise W. Knutsen, Geronimo L. Villanueva, Giuliano Liuzzi, Matteo M. J. Crismani, Michael J. Mumma, Michael D. Smith, Ann Carine Vandaele, Shohei Aoki, Ian R. Thomas, Frank Daerden, Sébastien Viscardy, Justin T. Erwin, Loic Trompet, Lori Neary, Bojan Ristic, Miguel Angel Lopez-Valverde, Jose Juan Lopez-Moreno, Manish R. Patel, Ozgur Karatekin, and Giancarlo Bellucci. Comprehensive investigation of Mars methane and organics with ExoMars/NOMAD. , 357:114266, March 2021.
- [37] G. L. Villanueva, M. D. Smith, S. Protopapa, S. Faggi, and A. M. Mandell. Planetary Spectrum Generator: An accurate online radiative transfer suite for atmospheres, comets, small bodies and exoplanets. , 217:86–104, September 2018.

- [38] F. Montmessin, O. I. Korablev, A. Trokhimovskiy, F. Lefèvre, A. A. Fedorova, L. Baggio, A. Irbah, G. Lacombe, K. S. Olsen, A. S. Braude, D. A. Belyaev, J. Alday, F. Forget, F. Daerden, J. Pla-Garcia, S. Rafkin, C. F. Wilson, A. Patrakeev, A. Shakun, and J. L. Bertaux. A stringent upper limit of 20 pptv for methane on Mars and constraints on its dispersion outside Gale crater. , 650:A140, June 2021.
- [39] The NOMAD - Nadir and Occultation for MArS Discovery - Science and Technical Team. <https://nomad.aeronomie.be/index.php/team>. Marzo de 2023.
- [40] CPESS-7 - 7th edition of the planetary sciences and solar system exploration meeting. <https://www.cpeess7.com/93374/detail/7o-edicion-de-la-reunion-de-ciencias-planetarias-y-exploracion-del-sistema-solar.html>. 2023.
- [41] Belmonte Giménez, Ángel. Búsqueda de HCl en la atmósfera de Marte mediante la técnica de ocultación solar en el infrarrojo con el espectrómetro NOMAD de la misión ESA Trace Gas Orbiter. Trabajo Fin de Máster. Universidad de Granada / Instituto de Astrofísica de Andalucía, febrero 2023.

# Anexo: subrutinas desarrolladas para este trabajo

A continuación se presentan diversas subrutinas de *Python* que han sido implementadas durante la elaboración de este trabajo, junto con una breve descripción de su funcionalidad. Como se mencionó anteriormente, estas subrutinas se integrarán en el *Pre-Processing* desarrollado en el IAA. Sin embargo, estoy dispuesto a compartir los códigos subyacentes previa solicitud razonable.

- **def leer\_espectros\_h5\_format**

Lectura de archivos binarios en formato HDF5 generados por el *Pre-Processing*, y extracción de los datos de transmitancias atmosféricas de NOMAD, número de onda, transmitancia debido al continuo de aerosoles, y primera corrección al *bending* mediante ajuste polinómico en cada espectro. Véase capítulo 2 para mas detalles.

- **def leer\_archivo\_par**

Lectura de archivos de la base espectroscópica HITRAN y extracción de las variables de interés: números de onda del centro de las líneas espectrales de las moléculas e isótopos de interés, intensidades en el centro de las líneas. La extracción se realiza en dentro de un intervalo de números de onda especificado por el usuario y devuelve los resultados ya filtrados y ordenados por intensidad de línea.

- **def suavizar\_curva**

Aplica un suavizado a una curva utilizando el filtro *Savitzky-Golay*.

- **def filtrado\_wavelet**

Realiza un filtrado wavelet en un espectro utilizando la descomposición wavelet y la reconstrucción.

- **def spectra\_averager**

Calcula el promedio de los espectros de transmisión en un rango de altitudes y números

de onda especificado. Retorna el promedio y la desviación estándar móvil del promedio.

- **def selec\_espectros**  
Selecciona los espectros dentro de un rango de altitudes específico.
  - **def selec\_continuos**  
Selecciona los valores del continuo dentro de un rango de altitudes específico.
  - **def selec\_wn**  
Selecciona los valores de números de onda dentro de un rango específico.
  - **def promediador\_espectros**  
Calcula el promedio de los espectros de transmisión y realiza correcciones adicionales si se especifica.
  - **def desviacion\_estandar\_movil**  
Calcula la desviación estándar móvil de un espectro utilizando una ventana móvil.
  - **def fig\_plotter**  
Genera gráficas de los espectros seleccionados y el promedio, junto con las líneas de absorción y el continuo.
- **def mean\_alt\_interval\_plot**  
Genera una gráfica de los promedios por intervalos de altura.
  - **def ch4\_upper\_limit**  
Calcula el límite superior de la abundancia de CH<sub>4</sub> basándose en la transmisión, el continuo y la desviación estándar.
  - **def fun\_abs\_upper\_lim**  
Calcula el límite superior de la abundancia de CH<sub>4</sub> a partir de la absorción utilizando una función lineal.