

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

SCUOLA DI SCIENZE
Corso di Laurea Magistrale in Fisica del Sistema Terra

Proprietà delle nubi e lontano infrarosso.
Studio del contenuto informativo negli spettri
simulati per RFTS (REFIR Fourier Transform Spectrometer)

Relatore:
Prof.
Tiziano Maestri

Presentata da:
Iacopo Sbroli

Sessione I
Anno Accademico 2016/2017

Un piccolo passo per me, un piccolo passo per tutti.

Sommario

Il 9 luglio 1996, con l'approvazione da parte della Commissione Europea di sei progetti nell'ambito del programma Ambiente e Clima, ebbero inizio la storia di REFIR (Radiation Explorer in the Far Infrared) e di FORUM (Far Infrared Outgoing Radiation Understanding e Monitoring). Come suggerisce il nome, il progetto REFIR ha come scopo precipuo lo studio dello spettro emesso dal sistema Terra-atmosfera nel lontano infrarosso, vale a dire nelle frequenze comprese approssimativamente tra i 100 cm^{-1} e i 660 cm^{-1} . Al momento, non sono presenti satelliti su cui sia installato uno spettrometro in grado di effettuare misure in questa porzione dello spettro.

Il progetto iniziò ufficialmente il 1° gennaio 1997 con lo studio della fattibilità di uno spettrometro a trasformata di Fourier che soddisfacesse i requisiti necessari per una missione spaziale [1]. Da allora sono stati fatti numerosi passi in avanti. È stato prodotto nel 2003 [2] un prototipo dello spettrometro, battezzato REFIR-PAD (Radiation Explorer in the Far Infrared - Prototype for Applications and Development), che è stato dapprima utilizzato in numerose campagne di osservazioni in molti punti della superficie terrestre (Alpi Italiane, Deserto di Atacama, Montagne Rocciose Statunitensi) e, nel dicembre 2011, è stato installato permanentemente nella base di ricerca italo-francese Concordia nel Plateau Antartico. Le numerose campagne di osservazione effettuate finora hanno provato le capacità di REFIR-PAD nel *retrieval* dei profili di vapore acqueo e delle proprietà delle nubi, evidenziando anche alcune limitazioni dei modelli spettroscopici attualmente disponibili.

Tuttavia, con l'eccezione di una campagna presso Teresina in Brasile, non sono disponibili misure dello strumento con una geometria al nadir, cioè effettuate osservando la superficie terrestre dall'alto. Dato che questa geometria sarà quella utilizzata per fare le misure da satellite, è necessario sopperire a questa lacuna effettuando delle simulazioni computerizzate. Il sottoscritto ha inteso effettuare queste simulazioni, con il supporto di numerosi scienziati coinvolti nel progetto SCIEF (Sviluppo delle Competenze Italiane per l'Esperimento Forum). Tali simulazioni sono state poi sottoposte a un'analisi tramite cui si è potuto stimare il guadagno di informazione nel retrieval delle proprietà delle nubi studiando l'intero spettro di emissione terrestre e non solo medio infrarosso (MIR o Mid Infrared, 660 cm^{-1} - 1600 cm^{-1}).

Il presente lavoro è suddiviso in sei sezioni. La prima sezione è un'introduzione generale al tema trattato, sia da un punto di vista fisico, sia da un punto di vista storico. La seconda sezione è dedicata alla descrizione dei modelli esistenti per simulare il trasferimento radiativo. La terza sezione descrive più in dettaglio la modalità delle simulazioni effettuate nel nostro caso. La quarta sezione è dedicata ad alcuni studi di sensibilità e alla descrizione di ICICLE, il codice di identificazione e classificazione delle nubi sviluppato nell'ambito del presente lavoro. La quinta sezione analizza a fondo i risultati ottenuti tramite ICICLE. La sesta, infine, è un succinto compendio conclusivo atto a riassumere i punti più importanti del presente lavoro.

Indice

1	Introduzione	1
1.1	Storia del progetto FORUM	1
1.1.1	Panoramica generale	1
1.1.2	REFIR e FORUM	2
1.2	Proprietà radiative dei gas atmosferici nell'infrarosso	4
1.3	Proprietà radiative delle nubi nell'infrarosso	7
1.4	COBRA	13
1.5	PRANA	19
2	Modelli	23
2.1	Introduzione	23
2.2	Determinazione degli spessori ottici	25
2.2.1	Intensità di riga	26
2.2.2	Forma di riga	26
2.3	Integrazione dell'equazione di trasferimento radiativo	31
2.3.1	Risoluzione in condizioni di cielo sereno	31
2.3.2	Risoluzione nel caso generale	31
2.3.3	Metodo delle ordinate discrete	33
2.3.4	Adding and doubling	34
2.4	Modelli diretti e modelli inversi	35
2.4.1	Line by Line Radiative Transfer Model (LbLRTM)	36
2.4.2	RT3	37
2.4.3	Geofit Broad Band (GBB)	38
3	Simulazioni	41
3.1	Introduzione	41
3.2	Raccolta e costruzione dei profili	42
3.3	Descrizione delle simulazioni	43
4	Analisi dei dati	49
4.1	Introduzione	49
4.2	Studi di sensibilità	50
4.2.1	Primo studio: cirri <i>subvisible</i>	51
4.2.2	Secondo studio: dimensioni dei cristalli	52
4.2.3	Terzo studio: <i>habit</i> dei cristalli	56
4.2.4	Quarto studio: sensibilità alla fase	59
4.3	ICICLE	61

4.3.1	Support Vector Machine: trattazione intuitiva	62
4.3.2	Support Vector Machine: trattazione matematica	65
4.3.3	ICICLE: una panoramica	68
4.3.4	Debolezze del programma	71
5	Risultati	73
5.1	Introduzione	73
5.2	Primo caso studio per ICICLE: cloud mask	76
5.2.1	I canali ottimizzati	77
5.2.2	Il run di controllo	78
5.2.3	Studio di sensibilità del codice	82
5.3	Secondo caso studio: classificazione secondo la fase	89
5.3.1	I canali ottimizzati	89
5.3.2	Run di controllo	90
5.3.3	Primo run parallelo: kernel gaussiano	92
5.3.4	Secondo run parallelo: ricerca di parametri ottimali	93
5.3.5	Terzo run parallelo: ancora kernel gaussiano	94
6	Conclusioni	95
A	Guida all'uso di RT3	97
B	Guida all'uso di ICICLE	99
B.1	Il file Input.dat e la subroutine <i>Lettura degli Input</i>	99
B.1.1	Prima sezione: canali e feature	99
B.1.2	Seconda sezione: errore sulla radianza	101
B.1.3	Terza sezione: riduzione dell'errore	101
B.1.4	Quarta sezione: classi	102
B.1.5	Quinta sezione: cartelle	102
B.1.6	Sesta sezione: impostazioni per libsvm	102
B.1.7	Settima sezione: grafici	103
B.1.8	Ottava sezione: miscellanea	103
B.1.9	Conclusioni	104
B.2	La subroutine <i>Conteggio Classi</i>	104
B.3	La subroutine <i>Lettura e Conversione</i>	105
B.4	La subroutine <i>Suddivisione</i>	105
B.5	La subroutine <i>Ricerca delle Corrispondenze</i>	106
B.6	La subroutine <i>Ottimizzazione</i>	106
B.7	La subroutine <i>Support Vector Machine</i>	107
B.7.1	Prima fase: cross validation	107
B.7.2	Selezione dei valori C e γ ottimali	108
B.7.3	Classificazione finale	109
B.8	Le subroutine <i>Plot Accuratezze</i> e <i>Scatter Plot</i>	109
B.9	ICICALL: la funzione chiamante	110

Sezione 1

Introduzione

1.1 Storia del progetto FORUM

1.1.1 Panoramica generale

Il progetto volto al lancio di uno spettrometro a trasformata di Fourier per lo studio del sistema Terra-atmosfera nel lontano infrarosso si è sviluppato gradualmente, di pari passo con la consapevolezza dell'importanza che questa porzione dello spettro ricopre nel bilancio radiativo terrestre. L'applicazione delle nozioni spettroscopiche relative al lontano infrarosso, espansesi ampiamente negli anni cinquanta e sessanta con la grande crescita della spettroscopia a trasformata di Fourier, furono già applicate in alcuni studi pionieristici del professor John Edward Harries dell'Imperial College di Londra per studiare la distribuzione del vapore acqueo in stratosfera (1973). Nonostante questo interesse, le difficoltà tecniche hanno rallentato la ricerca in questa porzione dello spettro: l'energia dei fotoni nel lontano infrarosso è bassa rispetto a quella dei fotoni nel medio infrarosso e nel visibile, e allo stesso tempo non sono disponibili adeguate fonti monocromatiche di radiazione per poter sfruttare la tecnica dell'eterodina, come si fa abitualmente per le onde radio e per le microonde.

Con il passare degli anni si è tuttavia giunti alla conclusione che è necessario studiare il lontano infrarosso in modo più esteso e approfondito, per molteplici ragioni. Anzitutto, alle lunghezze d'onda comprese tra i 100 e i 660 cm^{-1} , il sistema Terra-atmosfera emette circa il 45% della propria irradianza, per cui è estremamente importante disporre di modelli che sappiano predire in che modo la presenza dei gas atmosferici può influenzare questa irradianza. È importante sottolineare che è possibile creare modelli affidabili solo se possediamo un grande database di misure, perché la spettroscopia di laboratorio non è capace di spiegare da sola le possibili anomalie che si possono osservare nello studio dello spettro emesso da un'intera colonna di atmosfera terrestre. In secondo luogo, è stato dimostrato che il contenuto informativo relativo al vapore acqueo e delle proprietà fisiche delle nubi aumenta includendo nei modelli inversi il lontano infrarosso (Merrelli, 2012). Vale quindi la pena disporre di uno strumento che possa misurare spettri in questa porzione dello spettro dallo spazio. L'obiettivo del presente lavoro è quantificare il guadagno di informazione che lo strumento RFTS (Refir Fourier Transform Spectrometer) otterrebbe analizzando anche il FIR e non solo il MIR, anche per sostenere la robustezza della candidatura di FORUM al bando per il progetto Earth Explorer 9 dell'Agenzia Spaziale Europea.

1.1.2 REFIR e FORUM

Come si può constatare consultando il sito della Commissione Europea (si veda l'oggetto [4] della bibliografia), REFIR è stato concepito come un insieme di strumenti che, dallo spazio, avrebbe dovuto osservare la radianza emessa dalla superficie terrestre nella banda spettrale compresa tra i 9 e i 100 μm (vale a dire, tra i 100 e i 1100 cm^{-1}). Lo strumento avrebbe dovuto avere una risoluzione di 0.5-1 cm^{-1} . Tra gli obiettivi scientifici precipui ci sarebbe stata la precisa determinazione del VMR dei costituenti atmosferici, tale da permettere una più precisa stima del bilancio radiativo del nostro pianeta. REFIR sarebbe dovuto essere composto dai seguenti strumenti:

- Uno spettrometro a trasformata di Fourier, RFTS
- Il *REFIR embedded imager* (REI), agente in una finestra dell'infrarosso, atto all'identificazione dello scenario (cielo sereno o nuvoloso)
- Il *REFIR total energy radiometer* (RTER), un radiometro a banda larga per raccogliere la radianza totale emessa tra gli 0.3 e i 100 μm .
- Il *REFIR Add-on Imager* (RAI), atto a raccogliere immagini del pianeta.

La massa dello strumento sarebbe dovuta essere di 70 kg e avrebbe dovuto consumare 82 W di potenza, rendendolo adatto a una missione su un piccolo satellite nella *low Earth orbit* (LEO), vale a dire al di sotto delle insidiose fasce di Van Allen (presenti dai 2000km di quota in su). Si sperava di ottenere, tramite REFIR, le seguenti informazioni:

- Il ruolo del lontano infrarosso dell'emissione planetaria, che dà un importante contributo al raffreddamento dell'atmosfera e, al contrario di altre bande, ha la sua sorgente nella media e alta troposfera.
- Il ruolo del vapore acqueo nella modulazione dell'emissione planetaria verso lo spazio. Cade infatti nel vapore acqueo la banda rotazionale pura del vapore acqueo, di cui si parlerà più in dettaglio nei prossimi paragrafi.
- Il ruolo delle nubi nella modulazione dell'emissione planetaria verso lo spazio, tramite nuove tecniche di analisi dati e la disponibilità tramite gli strumenti REI e RAI di REFIR per l'identificazione dello scenario.
- La qualità della nostra conoscenza riguardo alle proprietà di assorbimento del vapore acqueo, in particolare l'effetto di secondo ordine del continuo (si tratta di un assorbimento al di fuori delle normali righe di emissione, difficile da giustificare con le teorie spettroscopiche). Tale conoscenza avrebbe di certo aumentato la qualità delle nostre simulazioni in fatto di radianza, flussi e *heating rate*. Ciò è importante anche per valutare la bontà dei modelli di circolazione generale: le informazioni ricavate con dettaglio spettrale sono certamente maggiori rispetto a quelle disponibili oggi, integrate nel dominio della frequenza.

Il documento a cui ci si riferisce è stato pubblicato il 1° marzo 2001. Proprio in quell'anno, anche grazie a uno studio finanziato dall'ESA, è stato possibile realizzare un primo prototipo, REFIR-BB, prodotto dall'IFAC-CNR (Istituto di Fisica Applicata "Nello Carrara", Consiglio Nazionale delle Ricerche). Tale prototipo, prodotto per esplorare la banda rotazionale del vapore acqueo, rispetta tutti i requisiti elencati in precedenza, necessari per una missione spaziale. Due anni dopo, l'IFAC-CNR produsse un secondo prototipo, REFIR-PAD, del tutto simile al predecessore ma migliorato in alcuni aspetti. Nella tabella sottostante si fa un raffronto tra i due prototipi [5]. Come si evince dalla tabella 1.1, un notevole vantaggio di REFIR-PAD è la sua operatività a temperatura ambiente. Non sono quindi necessari

PROPRIETÀ	REFIR-BB	REFIR-PAD
Banda spettrale	100-1100 cm^{-1}	100-1400 cm^{-1}
Risoluzione (max)	0.25 cm^{-1}	0.25 cm^{-1}
Throughput ottico	0.01 $\text{cm}^2 \text{ sr}$	0.0097 $\text{cm}^2 \text{ sr}$
Campo di vista	0.23 rad	0.100 rad
Tempo per misura	10-120 s	10-120 s
NESR (rumore)	$1.3 \frac{\text{mW}}{\text{m}^2 \text{ sr cm}^{-1}}$	$1 \frac{\text{mW}}{\text{m}^2 \text{ sr cm}^{-1}}$
Dimensioni	62 cm diam x 26 cm	62 cm diam x 26 cm
Peso	55 kg	55 kg
Consumo di potenza	75 W	50 W
Temperatura a cui opera	Temperatura ambiente	Temperatura ambiente

Tabella 1.1: Confronto tra REFIR-BB e REFIR-PAD.

Campagne di breve durata					
Luogo	Data	Ora (UTC)	Tempo**	Banda***	Risoluzione***
Teresina, Brasile*	30 giugno 2005	08:05-15:48	6.4	100 – 1100	0.475
Monte Morello, Italia	6 febbraio 2006	16:26-17:58	5.1	350 – 850	0.5
Monte Gomito, Italia	13 marzo-14 marzo 2006	16:20-09:30	6.1-9.9	350 – 1100	0.5
Testa Grigia, Italia	4 marzo 2007	19:20-23:39	5.1	240 – 1400	0.5
Testa Grigia, Italia	5-6 marzo 2007	17:54-00:43	5.1	240 – 1400	0.5
Testa Grigia, Italia	9 marzo 2007	07:24-13:53	5.1	240 – 1400	0.5
Testa Grigia, Italia	11-12 marzo 2007	16:22-02:06	5.1	240 – 1400	0.5
Testa Grigia, Italia	12 marzo 2007	08:44-15:45	5.1	240 – 1400	0.5
Testa Grigia, Italia	12 marzo 2007	17:55-23:02	5.1	240 – 1400	0.5
Testa Grigia, Italia	13 marzo 2007	09:15-14:03	5.1	240 – 1400	0.5
Testa Grigia, Italia	13-14 marzo 2007	18:21-08:04	5.1	240 – 1400	0.5
Breuil-Cervinia, Italia	15 marzo 2007	15:14-23:09	5.1	350 – 1400	0.5
Pagosa Springs, USA	22 aprile 2009	17:15-19:58	5.1	350 – 1400	0.5
Pagosa Springs, USA	23 aprile 2009	22:23-23:31	5.1	350 – 1400	0.5
Pagosa Springs, USA	24 aprile 2009	11:30-17:58	5.1	350 – 1400	0.5
Pagosa Springs, USA	25 aprile 2009	12:33-18:23	5.1	350 – 1400	0.5
Pagosa Springs, USA	27 aprile 2009	12:34-18:05	5.1	350 – 1400	0.5
Pagosa Springs, USA	28 aprile 2009	14:09-17:59	5.1	350 – 1400	0.5
Pagosa Springs, USA	29 aprile 2009	19:04-23:29	5.1	350 – 1400	0.5
Campagne di lunga durata					
Luogo	Data		Tempo**	Banda***	Risoluzione***
Cerro Toco, Cile	21 agosto-24 ottobre 2009		5.1	100 – 1400	0.5
Concordia, Antartide	Dicembre 2011-oggi		5.1	100 – 1400	0.4

*Misure fatte con geometria al nadir

**Tempo per effettuare una singola misura, espresso in minuti

***In cm^{-1}

Tabella 1.2: Campagne di misura di REFIR-PAD

costosi sistemi di raffreddamento per farlo funzionare.

Lo strumento REFIR-PAD, come si è già accennato, è stato utilizzato in numerose campagne di osservazioni. Nella tabella 1.2 se ne riassumono i dati essenziali. Durante tali campagne sono stati raccolti i dati necessari a rendere strutturata la proposta di una missione, chiamata FORUM, ai bandi Earth Explorer dell'ESA. Nel giugno 2017, è stata inviata la candidatura di FORUM al bando per la missione Earth Explorer 9: nel novembre 2017 sarà annunciato il progetto vincitore del bando.

A FORUM partecipano numerosi gruppi, facenti capo all'IFAC-CNR, all'Imperial College di Londra, al Dipartimento di Fisica dell'Università di Bologna, alla Clough Radiation Associates e altri [6]. Avendo familiarità con i membri del gruppo del Dipartimento di Fisica dell'Università di Bologna, ho studiato con maggiore cura le campagne di osservazioni a cui hanno contribuito in modo sostanziale questi ultimi, tra cui COBRA (Campagna di Osservazioni della Banda Rotazionale del vapor d'Acqua: in inglese è ECOWAR, Earth COoling by WAter vapouR emission), cioè la campagna effettuata nelle Alpi Italiane (nelle basi di Testa Grigia e Breuil-Cervinia) e PRANA (Proprietà Radiative del vapore Acqueo e delle nubi in Antartide). Nei prossimi capitoli tratterò con maggiore dettaglio queste campagne di osservazioni. Tuttavia, prima di affrontare questo tema, è opportuno spiegare in maggiore dettaglio alcuni concetti fisici che saranno utili alla comprensione dei risultati ottenuti tramite COBRA e PRANA.

1.2 Proprietà radiative dei gas atmosferici nell'infrarosso

Se l'atmosfera terrestre non contenesse gas in grado di assorbire radiazione infrarossa, il trasferimento radiativo del sistema Terra-atmosfera sarebbe semplice. Il sole, irradiando la Terra con una certa potenza, ne riscalderebbe la superficie che, a ogni lunghezza d'onda, emetterebbe una radianza proporzionale a quella data dalla legge di Planck e moltiplicata per l'emissività del suolo a tale lunghezza d'onda. Verrebbe raggiunta una temperatura di equilibrio media, pari a 255 K, ottenuta uguagliando la radiazione solare assorbita dal sole e quella riemessa dalla Terra a onda lunga.

Nella realtà, la presenza di un'atmosfera ricca di assorbitori di varia natura, rende il trasferimento radiativo in atmosfera molto complesso. Tra i gas assorbitori nell'infrarosso si annoverano i seguenti:

- Il diossido di carbonio (CO_2) una molecola triatomica lineare il cui VMR (volume mixing ratio) è in costante aumento nella nostra atmosfera a causa dell'inquinamento di origine antropica. Oggi, il suo VMR medio è pari a circa 400 ppmv (parti per milione in volume);
- Il vapore acqueo (H_2O) una molecola triatomica polare di forma irregolare (tecnicamente, si tratta di un *rotore asimmetrico*), che assorbe radiazione in gran parte dell'infrarosso;
- Il metano (CH_4) un gas serra molto potente e in aumento a causa dell'inquinamento, come il diossido di carbonio, ma presente in quantità molto inferiori rispetto ad esso (mediamente, attorno a 1 ppmv);
- L'ozono (O_3) una molecola triatomica irregolare presente soprattutto in stratosfera, ma in quantità inferiori anche in troposfera. L'inquinamento può aumentarne la presenza nelle grandi metropoli. La passata produzione di clorofluorocarburi (CFC) ne ha invece ridotto la vitale presenza in stratosfera;
- Alcuni ossidi dell'azoto, del carbonio, del cloro e dello zolfo, come NO, NO_2 , CO, ClO e SO_2 ;

- Alcuni acidi, come l'acido nitrico (HNO_3), presente in stratosfera durante la notte polare antartica), l'acido cianidrico (HCN) e l'acido ipocloroso (HOCl);
- I clorofluorocarburi, composti chimici di origine sintetica, utilizzati diffusamente fino alla fine degli anni 90 per molteplici scopi. Si producono a partire da composti organici, come il metano (CH_4), sostituendo fluoro e cloro agli atomi di idrogeno. A causa del loro rapido impatto sul fenomeno stagionale del buco dell'ozono antartico, si è deciso di metterli completamente al bando entro il 2030 tramite il protocollo di Montréal (16 settembre 1987). In Unione Europea sono stati messi al bando a partire dal 1° gennaio 2015.

La lista non si esaurisce qui: anche l'azoto e l'ossigeno gassosi (N_2 e O_2) assorbono radiazione nell'infrarosso, ma tale assorbimento è molto ridotto rispetto a quello dovuto alle altre molecole elencate.

A questo punto, viene spontaneo chiedersi per quale motivo certi gas assorbano radiazione infrarossa e altri no, e per quale motivo alcuni ne assorbano in quantità maggiore rispetto ad altri. Rispondere a questa domanda richiede nozioni di meccanica quantistica. La risposta, dal canto suo, costituisce il primo passo nella realizzazione di un modello affidabile per il calcolo del trasferimento radiativo in atmosfera.

Prima di tutto, è importante sottolineare che i gas non si comportano, in generale, come dei corpi neri come concepiti da Planck. La radiazione assorbita dai gas varia nettamente con la lunghezza d'onda: non segue un profilo liscio come quello della curva Planckiana. Più precisamente, il gas assorbe ed emette radiazione solo in certe regioni dello spettro, dette *bande*, fitti gruppi di *righe* spettrali molto strette. Esiste anche un effetto del secondo ordine, detto *continuo*, che si estende anche al di fuori delle righe. Ogni specie chimica possiede il proprio spettro di assorbimento caratteristico. Il diossido di carbonio, per esempio, presenta una banda di assorbimento particolarmente forte in corrispondenza dei 667 cm^{-1} . Il metano ha una banda centrata attorno ai 1250 cm^{-1} . Il vapore acqueo, dal canto suo, assorbe radiazione in gran parte dell'infrarosso, eccetto che in due regioni dette *finestre atmosferiche*, centrate rispettivamente attorno ai 1000 cm^{-1} e ai 2700 cm^{-1} .

Il diverso comportamento di ciascuna molecola è da ricercarsi nella sua struttura atomica, la quale regola l'interazione tra la molecola e la radiazione elettromagnetica. Senza entrare troppo nei particolari, riconosciamo prima di tutto che le molecole di gas possiedono $3N$ gradi di libertà, dove N è il numero di atomi che compongono la molecola. Ciascun atomo può, infatti, muoversi nelle tre dimensioni spaziali. Sarà tuttavia vincolato a mantenere una certa distanza media rispetto agli altri atomi che compongono la molecola. Questi vincoli producono i seguenti tipi di gradi di libertà:

- Gradi di libertà traslazionali, pari a 3 per tutte le molecole.
- Gradi di libertà rotazionali, pari a 2 per le molecole biatomiche e a 3 per le molecole composte da 3 o più atomi (dette poliatomiche).
- Gradi di libertà vibrazionali, cioè i rimanenti $3N - 5$ (per le molecole biatomiche) o $3N - 6$ (per le molecole poliatomiche).

A ciascun grado di libertà può corrispondere o meno la quantizzazione dell'energia. I gradi di libertà rotazionali, ad esempio, sono quantizzati: l'energia relativa a essi potrà assumere soltanto certi valori. Lo stesso vale per i gradi di libertà vibrazionali, ma non per quelli traslazionali. Vale la pena sottolineare che a causa delle cosiddette *regole di selezione*, lo stato vibrazionale della molecola muta solo se accompagnato da un cambiamento dello stato rotazionale. Per questo motivo si parla di transizioni roto-vibrazionali e mai di transizioni vibrazionali pure.

La radiazione elettromagnetica incidente sulla molecola potrà essere assorbita solo se la sua energia corrisponderà esattamente alla differenza di energia tra due stati rotazionali o roto-vibrazionali della molecola in questione. Questo non è tuttavia un requisito sufficiente. Ad esempio, in una approssimazione del primo ordine detta *approssimazione di dipolo*, una molecola potrà assorbire radiazione utile al cambiamento del proprio stato rotazionale solo se provvista di un momento di dipolo permanente (ad esempio, il vapore acqueo). Ciò non significa che la molecola in questione non possieda uno spettro rotazionale: in approssimazioni di ordine superiore i requisiti sono diversi. Nella spettroscopia Raman, dove si tiene conto della piccola probabilità che un fotone venga assorbito dalla molecola e un altro più debole venga diffuso, l'unico requisito è che la polarizzabilità elettrica della molecola sia anisotropa.

Regole simili si applicano alla spettroscopia roto-vibrazionale. In questo caso, l'approssimazione di dipolo impone, perché uno spettro roto-vibrazionale sia osservabile, che il momento di dipolo della molecola in questione vari nel corso della vibrazione: in altri termini, la derivata del momento di dipolo rispetto alla distanza tra le molecole deve essere diversa da zero.

In ultima analisi, la struttura a righe degli spettri dei gas è legata alla quantizzazione degli stati rotazionali e vibrazionali delle molecole, mentre le differenze individuali negli spettri dei gas sono da attribuire alle differenze tra i loro momenti di dipolo e a quanto variano tali momenti di dipolo nelle vibrazioni. In generale, gli spettri rotazionali e roto-vibrazionali si osservano, rispettivamente, nel lontano infrarosso e nel medio infrarosso. Molti dei gas atmosferici possiedono degli spettri roto-vibrazionali forti: prima di tutto il diossido di carbonio che, in due dei suoi tre *modi* di vibrazione, possiede un momento di dipolo variabile. L'ossigeno e l'azoto gassosi non possiedono uno spettro roto-vibrazionale apprezzabile.

Più raramente, i gas atmosferici presentano uno spettro rotazionale *puro* ugualmente forte, dato che diversi assorbitori non sono molecole polari o lo sono debolmente. Il diossido di carbonio, ad esempio, non è una molecola polare, come non lo è il metano. Il monossido di carbonio, e il diossido d'azoto e l'ozono possiedono invece uno spettro rotazionale, avendo un momento di dipolo permanente pari a, rispettivamente, 0.112, 0.316 e 0.530, Debye, dove un Debye è pari a $3.33 \cdot 10^{-30}$ Cm.

Lo spettro rotazionale dell'acqua è tuttavia quello dominante nella nostra atmosfera, sia perché il momento di dipolo permanente dell'acqua è pari a 1.855 ed è quindi molto più elevato di quello degli altri grandi assorbitori dell'atmosfera terrestre, sia perché l'acqua è presente in atmosfera in modo molto più abbondante rispetto agli altri gas (si arriva anche a 40000 ppmv nella bassa troposfera tropicale). Dato che l'acqua è anche uno dei maggiori gas serra, e dato che lo spettro rotazionale puro dell'acqua cade nel lontano infrarosso, è estremamente importante avere un buon modello di tale spettro per stimare l'entità dell'effetto serra. Dato che in laboratorio non è possibile riprodurre la complessa struttura dell'atmosfera reale, dove la pressione, la temperatura, la densità e la concentrazione dei gas mutano notevolmente con la quota, per produrre tale modello sono necessarie molte informazioni, che possono essere raccolte solo tramite uno o più strumenti che possano effettuare frequenti osservazioni su scala globale nel lontano infrarosso.

Nell'ambito della modellizzazione dello spettro rotazionale del vapore acqueo, le maggiori difficoltà non sono date dall'assorbimento di riga vero e proprio, ben compreso dal punto di vista teorico. Esse sono invece dovute al cosiddetto continuo, un effetto del secondo ordine che si estende anche lontano dalle righe. I ricercatori hanno tentato di giustificare dal punto di vista teorico questo assorbimento con delle particolari teorie collisionali, ma senza mai ottenere una riproduzione fedele dei dati misurati. Allo stato attuale i modelli ricorrono a dei fit, che possono essere effettuati accuratamente solo avendo a disposizione una notevole quantità di dati.

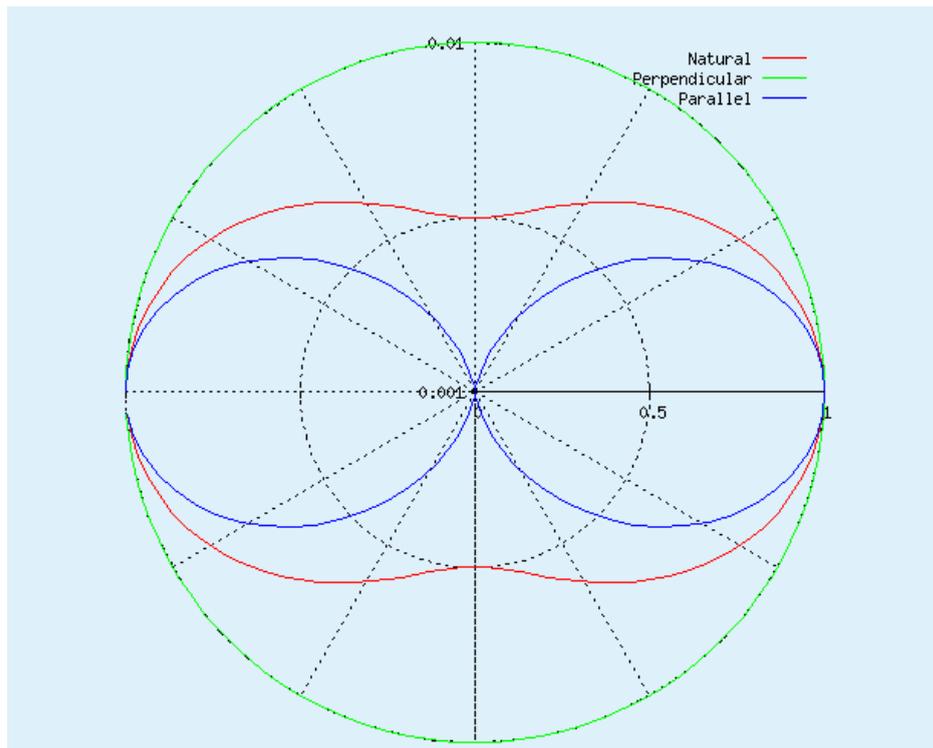


Figura 1.1: Funzione di fase per lo scattering di Rayleigh. Come si può osservare, la funzione di fase è simmetrica e il forward scattering è uguale al backward scattering.

1.3 Proprietà radiative delle nubi nell'infrarosso

Prima di descrivere in dettaglio le campagne di osservazioni, è necessaria una introduzione su una delle componenti chiave dell'atmosfera terrestre, cioè le nubi. L'aspetto che distingue le nubi dal resto dell'atmosfera è la loro composizione. Infatti, esse non sono costituite da gas, bensì da aerosol, particelle liquide o solide di dimensioni dell'ordine di alcuni micrometri in sospensione nell'atmosfera. Le nubi non sono gli unici aerosol presenti in atmosfera. Ne esistono in grande numero e in grande quantità, sia di origine antropica che non. Tuttavia, nella maggior parte dei casi, le nubi sono gli aerosol che hanno la massima influenza sul trasferimento radiativo nell'atmosfera terrestre. Vale quindi la pena trattarle separatamente.

Diffusione e assorbimento

È opportuno introdurre l'argomento con un'infarinatura teorica. L'attenuazione della radiazione incidente provocata da una particella può essere scomposta in due termini: un termine di *diffusione* e un termine di *assorbimento*. La diffusione consiste nella redistribuzione di una parte della radiazione incidente in tutte le direzioni, con intensità variabile a seconda dell'angolo, mentre l'assorbimento consiste nell'intercettazione di una frazione della radiazione da parte della particella. Le nubi si distinguono dai gas in entrambi gli aspetti.

Differenze tra le proprietà radiative delle nubi e quelle dei gas: la diffusione

Per evidenziare le differenze tra nubi e gas nella diffusione, può essere utile calcolare due quantità: l'efficienza e il rapporto tra *forward scattering* e *backward scattering*. La prima quantità è uguale per definizione al rapporto tra cross section di diffusione e sezione fisica della particella:

$$Q_{diff} = \frac{P_{diff}}{\pi r^2 E_{inc}} \quad (1.1)$$

Dove P_{diff} è la potenza diffusa, E_{inc} è l'irradianza incidente e πr^2 è la sezione fisica del centro di diffusione. Una maggiore efficienza indica quindi che una maggiore porzione di radiazione incidente è stata diffusa.

All'efficienza si associano generalmente altre due quantità. La prima è la sezione d'urto di diffusione:

$$\sigma_{diff} = \frac{E_{inc}}{P_{diff}} \quad (1.2)$$

E la seconda è il coefficiente di diffusione:

$$K_{diff} = n(r)\sigma_{diff} \quad (1.3)$$

dove $n(r)$ è la densità numerica dei centri di diffusione in un volume unitario.

L'insieme di queste tre quantità non è ancora sufficiente a dare un'idea degli effetti della diffusione, perché la distribuzione angolare della radiazione diffusa può variare. Un'idea di questa distribuzione angolare può essere data dal rapporto tra *forward scattering* e *backward scattering* $R = f_{w_{scat}}/b_{w_{scat}}$. Per comprendere meglio quanto detto, analizziamo il comportamento dei parametri Q_{diff} e R nel caso dei gas atmosferici e delle nubi.

La diffusione dei gas è regolata dal cosiddetto *scattering di Rayleigh*, che conferisce loro una efficienza dipendente dal reciproco della quarta potenza della lunghezza d'onda:

$$Q_{diff}(gas) \propto \frac{1}{\lambda^4}$$

dove θ è il cosiddetto angolo di diffusione.

L'efficienza $Q_{diff}(gas)$ nel lontano infrarosso è dunque trascurabile, ma il rapporto tra *forward scattering* e *backward scattering* è pari a 1, cioè la radiazione diffusa indietro è pari a quella diffusa in avanti (figura 1.1).

Gli aerosol che compongono le nubi, al contrario, sono di dimensioni molto maggiori e sono caratterizzati da un'efficienza di diffusione molto maggiore nell'infrarosso rispetto ai gas. Tuttavia, il rapporto tra *forward scattering* e *backward scattering* è generalmente molto elevato, cioè la radiazione viene prevalentemente diffusa in avanti (figure 1.2 e 1.3).

A complicare le cose, l'elevato spessore ottico delle nubi e la loro efficienza di diffusione relativamente alta permette l'esistenza del cosiddetto *scattering multiplo*: la radiazione incidente viene diffusa più volte da diversi centri di diffusione.

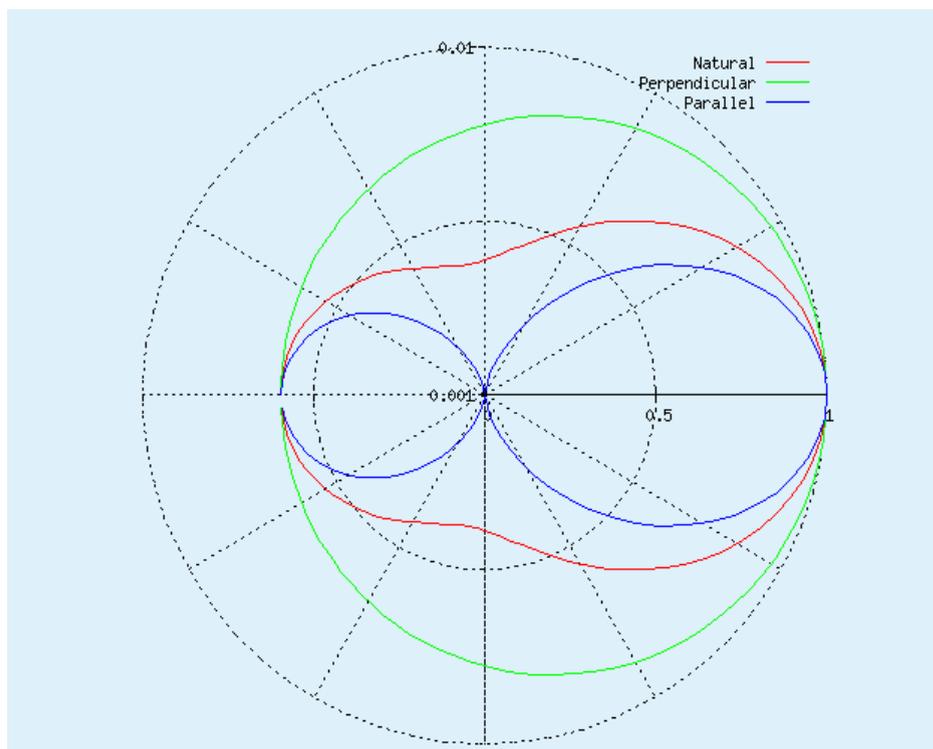


Figura 1.2: Funzione di fase per uno scattering di Mie moderato. La funzione di fase è stata calcolata per una sfera di ghiaccio di raggio $r = 3 \mu\text{m}$ a una lunghezza d'onda $\lambda = 400 \text{ nm}$. Come si può osservare, la funzione di fase non è simmetrica e il forward scattering è maggiore del backward scattering.

Differenze tra le proprietà radiative delle nubi e quelle dei gas: l'assorbimento

Per quanto riguarda le proprietà radiative in assorbimento, esse presentano maggiori regolarità rispetto a quelle che caratterizzano i gas. Questo fatto è dovuto alla presenza di legami chimici (nel caso dell'acqua e del ghiaccio, di legami a idrogeno) di intensità variabile, che danno origine a un notevole allargamento delle righe e alla regolarizzazione dello spettro di assorbimento. In generale, per i liquidi e per i solidi, si preferisce utilizzare la parte immaginaria dell'indice di rifrazione per calcolarne le proprietà in assorbimento, perché le teorie della diffusione per gli aerosol come la teoria di Mie richiedono tale indice di rifrazione come input. Per farsi un'idea di come tale indice di rifrazione è legato all'assorbimento, si faccia riferimento alla seguente equazione, esatta qualora sia valida l'approssimazione dell'ottica geometrica:

$$a = 1 - \exp\left(\frac{-2\pi m_i z}{\lambda}\right) \quad (1.4)$$

Dove a è l'assorbimento, m_i è la parte immaginaria dell'indice di rifrazione e z è lo spessore del mezzo attraversato dalla radiazione. Determinare la parte immaginaria dell'indice di rifrazione è possibile seguendo la seguente procedura. Prima di tutto, si misura tramite un rifrattometro la parte reale dell'indice di rifrazione per una gamma quanto più vasta di lunghezze d'onda. Successivamente, si utilizzano le relazioni di Kramer-Kronig per ottenerne la parte immaginaria.

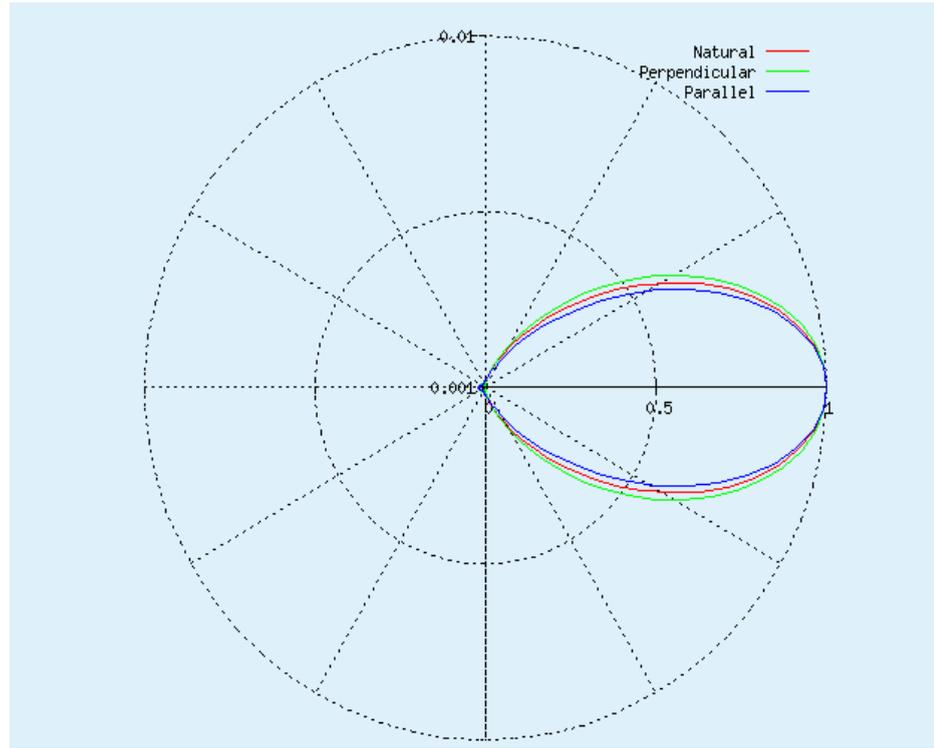


Figura 1.3: Funzione di fase per uno scattering di Mie intenso. La funzione di fase è stata calcolata per una sfera di ghiaccio di raggio $r = 20 \mu\text{m}$ a una lunghezza d'onda $\lambda = 400 \text{ nm}$. Come si può osservare, la funzione di fase non è simmetrica e il forward scattering è molto maggiore del backward scattering.

Un'infarinatura di teoria della diffusione

Determinare accuratamente le proprietà di assorbimento e di diffusione di una certa distribuzione di aerosol non è un compito semplice. Tali proprietà dipendono strettamente dalla forma degli aerosol e dalla distribuzione dimensionale che seguono, che nelle nubi può essere molto variabile.

Allo scopo di illustrare le proprietà diffusive delle nubi, è opportuno prima di tutto fare una panoramica generale della teoria della diffusione.

Quando un fotone si avvicina a una particella di aerosol, l'onda elettromagnetica piana associata al fotone stimola il moto delle molecole che compongono l'aerosol, le quali produrranno una piccola onda elettromagnetica sferica. L'intensità dell'onda diffusa in una certa direzione dipende solo dagli angoli zenitale e azimutale di incidenza del fotone, dalla sua lunghezza d'onda e dalle proprietà dell'aerosol, secondo una formula del tipo:

$$I(\lambda, for, \mathbf{m}, \theta_{inc}, \theta_{diff}, \phi_{inc}, \phi_{diff}) = F(\lambda, for, \mathbf{m})P(for, mat, \theta_{diff}, \theta_{inc}, \phi_{diff}, \phi_{inc}) \quad (1.5)$$

Dove λ è la lunghezza d'onda, θ è l'angolo zenitale, ϕ è l'angolo azimutale, for è la forma e \mathbf{m} sono gli indici di rifrazione dei materiali che compongono l'aerosol. I pedici indicano se l'angolo è di incidenza o di diffusione. La funzione $P(\theta_{diff}, \theta_{inc}, \phi_{diff}, \phi_{inc})$, che racchiude la dipendenza dell'intensità dell'onda

diffusa dall'angolo, è detta funzione di fase. Il suo integrale deve essere normalizzato secondo la formula:

$$1 = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} P(\theta_{diff}, \theta_{inc}, \phi_{diff}, \phi_{inc}) d\Omega \quad (1.6)$$

Il calcolo della funzione di fase è il primo passo necessario alla risoluzione dell'equazione di trasferimento radiativo in presenza di diffusione. Tale funzione di fase viene generalmente espressa in serie di Fourier nella sua componente azimutale e tramite polinomi di Legendre nella sua componente zenitale. Questa operazione può essere effettuata perché la serie di Fourier crea una base ortogonale per tutte le funzioni periodiche dell'intervallo $[0, 2\pi]$, mentre i polinomi di Legendre costituiscono una base ortogonale dell'intervallo non periodico $[-1, 1]$. La variabile angolo azimutale ϕ è infatti periodica nell'intervallo $[0, 2\pi]$ e la variabile $\mu = \cos(\theta)$ è definita nell'intervallo non periodico $[-1, 1]$.

Come si è già accennato in precedenza, l'intensità della radiazione diffusa dipende dalla forma e dalla composizione dell'aerosol. In generale, in una nube, sono presenti moltissimi aerosol, la cui densità numerica e la cui distribuzione dimensionale possono variare. La forma dei cristalli di ghiaccio è legata alle condizioni ambientali in cui si sono formati, tra cui la temperatura, l'intensità dei moti verticali e il contenuto di ghiaccio delle nubi (definito spesso IWC, *ice water content*). In generale, per determinare accuratamente l'effetto dello scattering nello spettro misurato, è necessario determinare la distribuzione dimensionale delle particelle presenti nelle nubi, la loro densità numerica, la loro forma e la loro composizione.

Teoria di Mie

Il caso più semplice da trattare, che ha pure una soluzione analitica sotto forma di serie, è quello di aerosol sferici o formati da gusci sferici concentrici di vari materiali. La determinazione delle proprietà di assorbimento e di diffusione prende in questo caso il nome di *teoria di Mie*. Tale teoria viene applicata quando la dimensione dei centri di diffusione è comparabile con la lunghezza d'onda della radiazione incidente. In altri termini, il cosiddetto *size parameter*:

$$x = \frac{2\pi d}{\lambda}$$

deve essere vicino a 1. Nel caso in cui $x \ll 1$, la dimensione del centro di diffusione sarà molto minore della lunghezza d'onda, e varrà la teoria dello scattering di Rayleigh. Nel caso in cui $x \gg 1$ la soluzione di Mie sarà ancora corretta, ma diverrà poco gestibile dal punto di vista computazionale e si preferirà utilizzare le stime dell'ottica geometrica.

È molto importante notare che nella teoria di Mie **le proprietà di diffusione e di assorbimento sono legate tra di loro**. Infatti, tramite la teoria di Mie è possibile determinare sia il coefficiente di diffusione K_{diff} che il coefficiente di estinzione $K_{est} = K_{ass} + K_{diff}$ dovuto all'interazione tra la radiazione incidente e il centro di diffusione. Tramite la teoria di Rayleigh, invece, è possibile determinare soltanto il coefficiente di diffusione K_{diff} . È importante sottolineare che **la teoria di Mie costituisce una valida prima approssimazione anche nel caso di aerosol non sferici**. La non sfericità dell'aerosol ha infatti un effetto del secondo ordine.

Per calcolare i coefficienti di diffusione e di estinzione, nella teoria di Mie, è necessario conoscere soltanto la distribuzione dimensionale degli aerosol, le parti reale e immaginaria dell'indice di rifrazione, e la densità numerica degli aerosol nell'aria. Dato che ciascuno di questi fattori ha un effetto sullo spettro, è possibile ricavare le informazioni relative alla struttura microfisica delle nubi operando

un'analisi dello spettro misurato. Includendo il lontano infrarosso nelle analisi, il contenuto di informazione relativo alle proprietà microfisiche delle nubi aumenta come è già stato dimostrato (Merrelli, 2012).

Questo fatto suggerisce che il lancio di una missione spaziale per lo studio dello spettro lontano infrarosso emesso dal sistema Terra-atmosfera possa fornirci una maggiore conoscenza delle proprietà microfisiche delle nubi del pianeta e della loro evoluzione nel tempo. Ciò è importantissimo. Infatti, le proprietà microfisiche delle nubi hanno un grande impatto sul bilancio radiativo del pianeta, e hanno in parte un effetto riscaldante e in parte un effetto raffreddante. Ad esempio, le nubi costituite dagli aerosol più piccoli causano un maggiore *backscattering* della radiazione solare incidente, ma la loro maggiore superficie efficace (a parità di contenuto d'acqua e ghiaccio) aumenta la loro capacità di assorbire radiazione, e dunque di contribuire all'effetto serra. Le nubi poste a quote più alte, a parità di *albedo*, causano un effetto serra maggiore rispetto alle nubi poste a quote più basse. Ciò che sarà dimostrato nelle prossime sezioni è che il retrieval delle proprietà delle nubi potrebbe essere effettuato con maggiore accuratezza se uno strumento come REFIR fosse incluso in una missione spaziale.

1.4 COBRA

Facendo riferimento alla tabella 1.2, si può notare che un buon numero delle campagne di osservazioni di REFIR-PAD sono state effettuate nelle Alpi Italiane nel marzo 2007. L'insieme di queste osservazioni è stato battezzato COBRA (Campagna di Osservazioni della Banda Rotazionale del vapore d'Acqua). COBRA è stato sostenuto dall'Istituto di Fisica Applicata "Nello Carrara" del Consiglio Nazionale delle Ricerche (Sesto Fiorentino), dall'Istituto Nazionale di Geofisica e Vulcanologia (Roma), dal Dipartimento di Ingegneria e Fisica dell'Ambiente dell'Università della Basilicata (Potenza), dal Dipartimento di Fisica dell'Università di Roma "La Sapienza" e dal Dipartimento di Fisica e Astronomia dell'Università di Bologna. Tale campagna si è prefissata il compito di studiare in dettaglio il *continuo* del vapore acqueo nel lontano infrarosso, in particolare al di sotto dei 400 cm^{-1} , dove i modelli producono i maggiori errori. Inoltre, data la presenza di cirri sottili durante alcuni cicli di osservazione, è stato pure possibile verificare se tramite i dati raccolti da REFIR-PAD fosse possibile recuperare le proprietà ottiche delle nubi. In tabella 1.3 sono fornite le condizioni del cielo per ogni ciclo di osservazioni [Palchetti et al, 2011].

Luogo	Data	Ora (UTC)	Condizioni del cielo
Testa Grigia	4 marzo 2007	19:20-23:39	Cirro (8-12 km)
Testa Grigia	5-6 marzo 2007	17:54-00:43	Sereno
Testa Grigia	9 marzo 2007	07:25-13:53	Cirro (7-10 km)
Testa Grigia	11-12 marzo 2007	16:22-02:06	Sereno
Testa Grigia	12 marzo 2007	08:44-15:45	Sereno
Testa Grigia	12 marzo 2007	17:55-23:02	Sereno
Testa Grigia	13 marzo 2007	09:15-14:03	Sereno
Testa Grigia	13-14 marzo 2007	18:21-08:04	Sereno
Breuil-Cervinia	15 marzo 2007	15:14-23:09	Sereno

Tabella 1.3: Condizioni del cielo nei cicli di osservazione di COBRA

La campagna di osservazioni si è svolta presso due località: la base Testa Grigia del CNR, localizzata nel Plateau Rosà (3480 mslm, 45.933 °N, 7.7 °E), e Breuil Cervinia (1990 mslm, 45.933 °N, 7.6 °E), posta a 5 km in linea d'aria dalla prima. Entrambe le località si trovano nelle Alpi italo-svizzere, nei pressi di Aosta. Sono state scelte due basi poste in alta quota perché la banda rotazionale del vapore acqueo, essendo molto intensa, rende opaca la bassa stratosfera nelle usuali condizioni di umidità delle medie latitudini, rendendo le osservazioni da quote pianeggianti molto povere di informazioni. In pianura, la radianza osservata nel lontano infrarosso seguirebbe approssimativamente una planckiana, dalla quale si potrebbe al più dedurre la temperatura del gas nei pressi dello strumento.

In alta quota, o in luoghi particolarmente secchi come il Deserto di Atacama, la banda rotazionale del vapore acqueo osservata con geometria allo zenit presenta invece una struttura più articolata e ricca di informazioni. Le righe di assorbimento sono intervallate da piccole regioni, dette *microfinestre*, dove l'assorbimento è dato unicamente dall'effetto del secondo ordine del continuo. A quote più basse queste microfinestre saturano, dando agli spettri nel lontano infrarosso l'aspetto di una planckiana. Le microfinestre sono regioni dello spettro molto importanti per determinare il bilancio radiativo terrestre. Infatti, la sensibilità dell'effetto serra alle variazioni del VMR del vapore acqueo è da ricercarsi in queste regioni e non nelle righe del vapore acqueo vere e proprie, che rimangono opache nonostante queste variazioni. Per questo e altri motivi, la campagna di osservazione COBRA si è prefissata di colmare le lacune teoriche e sperimentali esistenti nello studio della banda rotazionale del vapore acqueo.

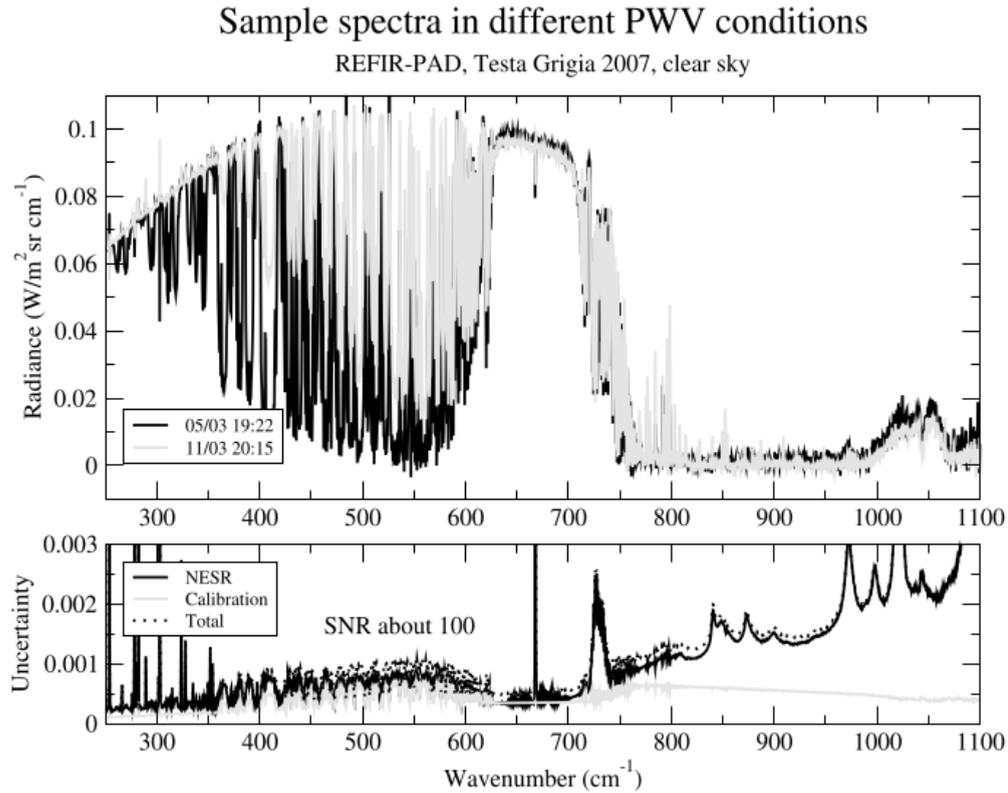


Figura 1.4: Esempio di spettri misurati da REFIR-PAD durante COBRA. Si nota a sinistra la banda rotazionale del vapore acqueo, dove le righe sono intervallate dalle microfinestre. Dai 350 cm^{-1} in giù l'atmosfera appare opaca nonostante l'altitudine elevata della base.

REFIR-PAD non è stato l'unico strumento impiegato nella campagna di osservazioni. Per verificarne e corroborarne i risultati sono stati utilizzati altri strumenti [Maestri et al., 2014], tra cui:

- I-BEST (Interferometer for Basic observations of the Emitted Spectral radiance of the Troposphere), un secondo spettrometro a trasformata di Fourier. Esso è stato installato nella base di Breuil-Cervinia nel corso di tutta la campagna;
- Un sistema per radionsondaggi Vaisala RS92k, installato pure presso Breuil-Cervinia;
- BASIL (BASILicata Raman Lidar system), un lidar RAMAN che, insieme allo strumento Vaisala RS92k, è stato utilizzato per stimare i profili verticali di numerose quantità fisiche di interesse, come la temperatura, la pressione e il VMR dei gas atmosferici, oltre che la quota della base e del *top* delle nubi. Anch'esso è stato installato presso Breuil-Cervinia;
- GBMS (Ground-Based Millimeter-wave Spectrometer), utilizzato per stimare il contenuto di acqua precipitabile (PWC) della colonna. Durante la campagna, è stato posto presso Testa Grigia assieme a REFIR-PAD.

REFIR-PAD è stato spostato da Testa Grigia a Breuil-Cervinia per l'ultimo ciclo di osservazioni (tabella 1.3). I risultati della campagna sono stati presentati in numerosi articoli (Bhawar et al., 2008; Serio et al., 2008; Palchetti et al., 2011; Maestri et al., 2014).

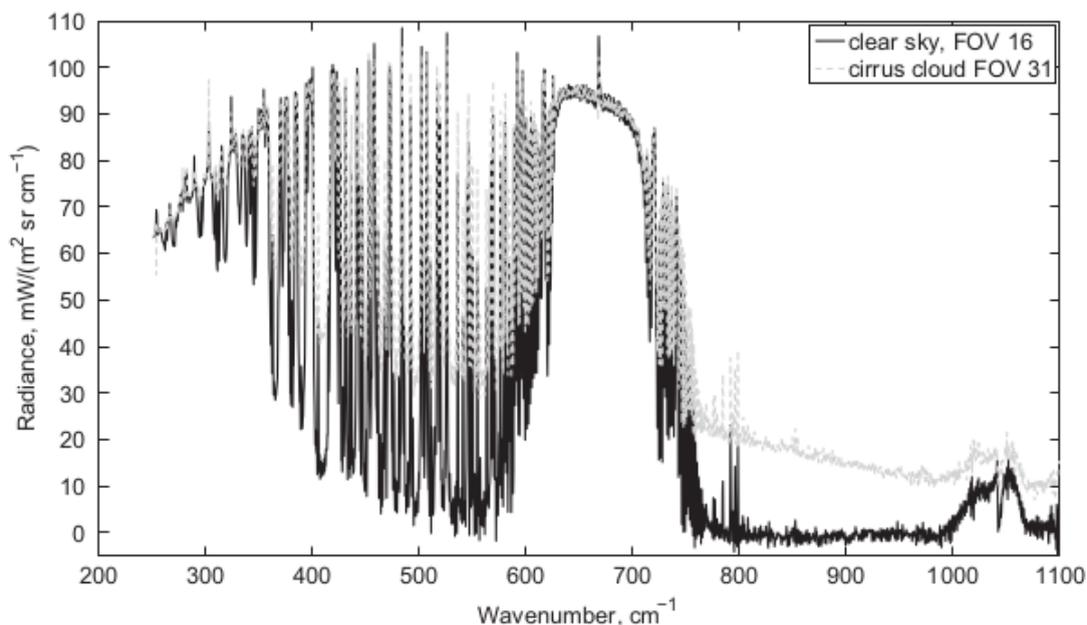


Figura 1.5: Esempio di spettri misurati da REFIR-PAD durante COBRA il 9 marzo 2007. Confronto tra le radianze osservate in presenza di cirro che in condizioni di cielo sereno.

Nel terzo articolo (Palchetti et al., 2011) si analizzano gli spettri acquisiti da REFIR-PAD nel primo giorno di campagna (4 marzo 2007), quando intorno alle ore 20:10 il cielo fu parzialmente coperto da nubi alte.

Tra le altre cose, si evidenzia che tramite i dati raccolti da REFIR-PAD è possibile effettuare il retrieval del PWC della colonna e del profilo del vapore acqueo per tre livelli atmosferici diversi, e come tramite l'analisi degli spettri misurati da REFIR-PAD sia possibile anche rilevare la presenza di cirri molto sottili, detti *subvisible*, il cui spessore ottico è per definizione inferiore a 0,03.

Nel quarto articolo (Maestri et al., 2014) sono stati analizzati gli spettri acquisiti il 9 marzo 2007, quando alle ore 9:00 UTC apparve un cirro che persistette per tutto il resto del ciclo di osservazioni di quel giorno. Lo spessore ottico del cirro, inferiore a 0.3 fino alle 11:50 UTC, si avvicinò a valori unitari alle 12:30 UTC e vi permase fino alle 13:50 UTC, cioè fino al termine delle osservazioni. Il lavoro prende in considerazione le ultime 8 sequenze di osservazione di REFIR-PAD effettuate quella giorno, corrispondenti all'intervallo di tempo tra le 12:30 UTC e le 13:50 UTC. Tali sequenze di osservazione sono dette FOV nell'articolo, dove FOV è un acronimo di *Field Of View*, ovvero campo di vista. I FOV presi in considerazione sono numerati da 24 a 31. I cirri analizzati in questo articolo non possono essere definiti *subvisible*, essendo il loro spessore ottico piuttosto grande, prossimo a 1.

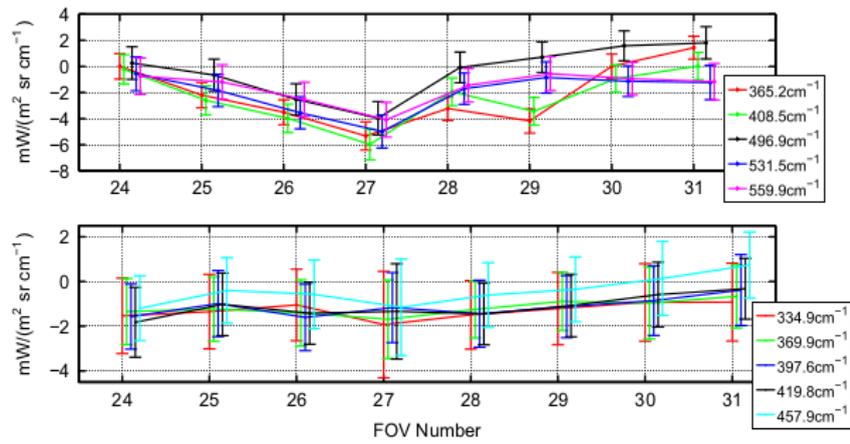


Figura 1.6: Differenza tra simulazioni e dati per i FOV presi in considerazione da Maestri et al., 2014. Nel pannello superiore si confrontano le differenze tra misure ed errori nelle regioni di microfinestra. Nel pannello inferiore, si confrontano le differenze tra misure ed errori nelle regioni più assorbenti della banda rotazionale del vapore acqueo.

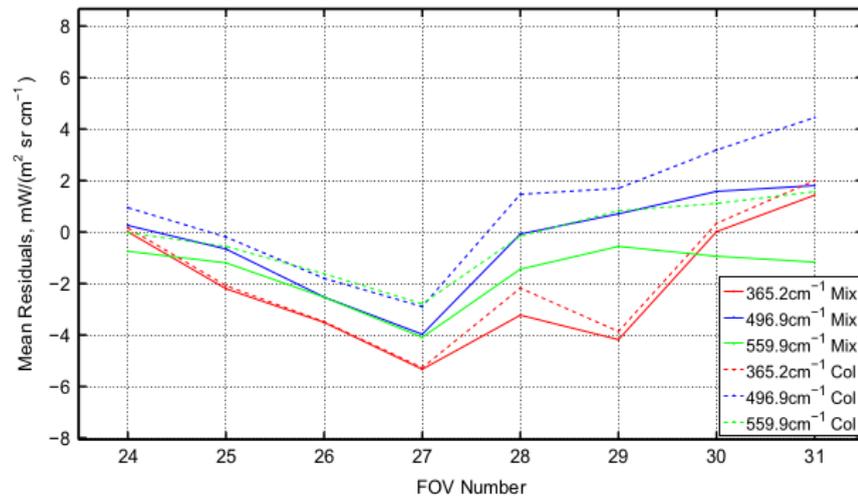


Figura 1.7: Differenza tra simulazioni e dati per i FOV presi in considerazione da Maestri et al., 2014. Nelle simulazioni rappresentate con una linea continua, si assume che la nube sia composta unicamente da colonne esagonali. Nelle simulazioni rappresentate con una linea tratteggiata, si assume una mistura standard di *habit* (forme) dei cristalli di ghiaccio.

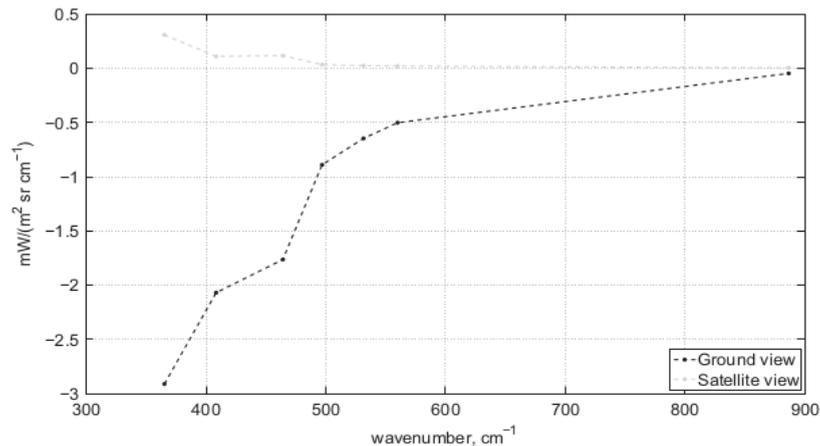


Figura 1.8: Differenza tra i valori di radianza simulata con il profilo di vapore acqueo recuperato e un profilo dove il VMR del vapore acqueo è stato aumentato del 10% a tutti i livelli. In nero, differenze per una geometria allo zenit. In grigio, differenze per una geometria al nadir.

Le analisi di Maestri et al., 2014, si basano sulla seguente sequenza operativa:

- Determinazione dei profili di temperatura, pressione e gas tramite elaborazione dei dati di BASIL, nella banda a 667 cm^{-1} della CO_2 di REFIR-PAD e della radiosonda (lanciata l'ultima volta alle 11:19, con acquisizione di dati fino alle 12:50). Tramite questi profili sono stati calcolati gli spessori ottici della colonna d'aria;
- Retrieval delle profondità ottiche delle nubi tramite le radianze di REFIR-PAD nella finestra principale dell'infrarosso ($820\text{-}960\text{ cm}^{-1}$);
- Simulazione, in base ai dati ottenuti nei primi due passi, delle radianze che REFIR-PAD misurerebbe, e confronto con i dati misurati effettivamente (tra i 250 cm^{-1} e 1100 cm^{-1});
- Studi di sensibilità alle proprietà microfisiche delle nubi e alla concentrazione di vapore acqueo delle radianze nel lontano infrarosso.

I risultati ottenuti sono stati molteplici. Anzitutto, si è evidenziato come nell'intervallo tra i 250 cm^{-1} e i 400 cm^{-1} i modelli non siano in grado di riprodurre le radianze misurate da REFIR-PAD entro l'errore strumentale, specialmente nelle importanti regioni di microfinestra che, saturando solo in presenza di nube, sono utili per identificare i cirri (figura 1.6, pannello superiore). Alcuni studi di sensibilità sono stati effettuati proprio per comprendere le ragioni di questa incogruenza tra simulazioni e dati. Anzitutto, gli autori hanno provato a valutare quanto impatto avesse la forma dei cristalli della nube sulla radianza simulata e hanno osservato cosa sarebbe accaduto utilizzando una mistura di forme al posto delle sole colonne esagonali utilizzate nella simulazione iniziale. L'impatto risulta essere nell'ordine di $1\text{ mW/m}^2\text{ sr cm}^{-1}$ (figura 1.7), non sufficiente a spiegare le differenze tra simulazioni e dati.

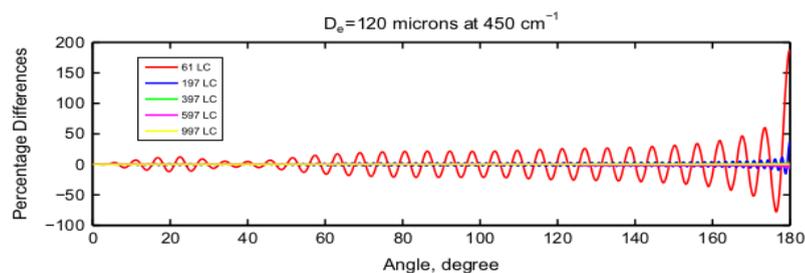


Figura 1.9: Differenza tra il valore della funzione di fase e la sua approssimazione con un certo numero di polinomi di Legendre. Si nota il grande errore ottenuto assumendo $lc = 61$

È stato fatto anche uno studio di sensibilità al volume mixing ratio del vapore acqueo. È stata quindi effettuata una simulazione includendo nella colonna un contenuto di vapore acqueo aumentato del 10% a tutti i livelli. È stato verificato che questa modifica produce un notevole aumento della radianza simulata rispetto al caso precedente, specialmente al di sotto dei 400 cm^{-1} , dove le differenze arrivano ad essere di $2\text{ mW/m}^2\text{ sr cm}^{-1}$, contro un errore strumentale di $0.1\text{--}1\text{ mW/m}^2\text{ sr cm}^{-1}$. In vista dell'utilizzo di RFTS in una missione spaziale, è stato effettuato anche uno studio di sensibilità alla variazione del contenuto di vapore acqueo in atmosfera, sia per una geometria allo zenit, sia per una geometria al nadir. L'aumento della radianza stimato per una geometria allo zenit è importante, mentre quello stimato per una geometria al nadir è molto più contenuto, e risulta essere comparabile all'errore strumentale.

L'articolo, oltre a rilevare questi fatti, evidenzia inoltre che un problema comune nella simulazione delle radianze nel lontano infrarosso è il frequente uso da parte dei ricercatori di un numero troppo basso di coefficienti dell'espansione in polinomi di Legendre delle funzioni di fase delle particelle diffondenti (i risultati sono mostrati in figura 1.9). Generalmente, dato che la diffusione nel lontano infrarosso gioca un ruolo meno importante che nel visibile, il numero di coefficienti lc utilizzato è abbastanza basso e pari a 61. A tale numero corrispondono 16 angoli zenitali per quadrante, secondo la relazione $lc = 4nz - 3$, valida quando si integra l'equazione di trasferimento radiativo tramite la *quadratura di Gauss*. L'articolo dimostra che utilizzando 61 coefficienti lc si ottiene un errore nelle radianze pari a $0.1\text{ mW/m}^2\text{ sr cm}^{-1}$, confrontabile con l'errore minimo di REFIR-PAD. È dunque importante curare tutti i dettagli nel modello diretto: non si commettano errori evitabili!

1.5 PRANA

Lo spettrometro a trasformata di Fourier REFIR-PAD, dopo aver operato in numerose campagne di osservazioni, è stato installato permanentemente presso Dome C, nella stazione italo-francese di Concordia, nel Plateau Antartico Orientale ($75^{\circ}06'S$, $123^{\circ}20' E$) a una quota di 3.233 metri sul livello del mare. L'installazione è avvenuta nel dicembre 2011, e da allora REFIR-PAD raccoglie spettri atmosferici con geometria allo zenit nella regione compresa tra i 100 e i 1400 cm^{-1} con risoluzione di 0.4 cm^{-1} in modo quasi continuo, sia in condizioni di cielo sereno che in condizioni di cielo nuvoloso. Il clima particolarmente secco del continente antartico e l'elevata quota geometrica danno la possibilità a REFIR-PAD di osservare le microfinesse nella banda rotazionale del vapore acqueo nonostante la geometria sfavorevole. L'insieme di queste osservazioni costituisce la campagna PRANA (Proprietà Radiative del vapore Acqueo e delle Nubi in Antartide).

Gli obiettivi precisi della campagna PRANA riflettono quelli del progetto REFIR e di altre campagne di osservazione come COBRA. Essi sono ([5, pag. 35]):

- Studio della banda rotazionale del vapore acqueo in condizioni atmosferiche naturali;
- Studio delle proprietà spettroscopiche delle nubi nel lontano infrarosso, e in particolare delle nubi stratosferiche polari, che sono causa del buco nell'ozono;
- Raccolta di una banca dati spettroscopica che permetta la messa a punto di modelli diretti e inversi con prestazioni sempre migliori, in particolare nella regione tra i 200 e i 450 cm^{-1} , dove sussistono ancora difficoltà teoriche notevoli.

A Dome C, è accompagnato da un lidar, che misura il backscattering e la depolarizzazione dei componenti atmosferici soprastanti, da radiosondaggi effettuati su base quotidiana e da una stazione meteo localizzata sul tetto dell'edificio di Fisica, dove è presente anche REFIR-PAD. Tali strumenti hanno lo scopo di integrarsi ai dati raccolti da REFIR-PAD per le procedure di *retrieval* (Palchetti et al., 2017).

L'installazione permanente di REFIR-PAD presso Dome C ha un ruolo fondamentale nello studio delle proprietà radiative dell'atmosfera nel lontano infrarosso. Infatti, il volume dei dati raccolti cresce di giorno in giorno: REFIR-PAD misura continuamente spettri in condizioni di cielo sereno e di cielo nuvoloso. Le condizioni del cielo sono note a priori grazie ai dati forniti della strumentazione ausiliaria. Tale conoscenza permette anche di valutare a posteriori la capacità di REFIR-PAD e del modello inverso utilizzato di determinare le condizioni del cielo. Il volume delle osservazioni ha permesso ai ricercatori di raccogliere spettri in presenza di nubi caratterizzate da dimensioni dei cristalli e spessori ottici variegati. In questo modo, sarà possibile valutare se i dati raccolti da REFIR-PAD potranno anche permettere un'accurata classificazione delle nubi, grazie alla comparazione dei dati raccolti con la strumentazione ausiliaria. Per dare un'idea della distribuzione delle dimensioni efficaci delle particelle delle nubi antartiche e del loro spessore ottico, sono stati riportati in figura 1.10 i risultati di un insieme di *retrieval* effettuati da Mahesh et al. nel 2001.

Un altro importante vantaggio offerto dalla campagna di osservazioni PRANA è la possibilità di studiare le proprietà delle nubi di ghiaccio con spessore ottico medio-basso, assai abbondanti in Antartide (come si può osservare in figura 1.10). Questo aspetto è importante per numerose ragioni. Anzitutto, sulla base del fatto che l'assorbimento del ghiaccio ha un minimo attorno ai 400 cm^{-1} (si veda la figura 1.11), le proprietà di diffusione delle particelle di aerosol che compongono le nubi risultano più importanti nel lontano infrarosso di quanto non lo siano nel medio infrarosso. Per illustrare il concetto, si farà un esempio. Supponiamo di avere una nube con spessore ottico unitario se misurato nella finestra

atmosferica, alla frequenza di 1000 cm^{-1} . Tale spessore ottico sarà minore se misurato a 400 cm^{-1} , dato che l'assorbanza del ghiaccio a questa frequenza è più bassa. Supponiamo che la diffusione avvenga a una distanza di 5 m dalla base della nube. Essendo lo spessore ottico a 400 cm^{-1} minore, un fotone diffuso a questa lunghezza d'onda avrà una maggiore possibilità di arrivare allo strumento rispetto a un fotone diffuso a 1000 cm^{-1} alla stessa distanza dalla base della nube. Lo strumento sarà dunque più sensibile alle proprietà di diffusione dei cristalli nel lontano infrarosso.

Con questa breve trattazione di PRANA si conclude la sezione introduttiva. Nel resto dell'elaborato saranno trattati in maggiore dettaglio numerosi argomenti che finora sono stati soltanto accennati. La prossima sezione sarà dedicata alla trattazione esaustiva dei modelli diretti di trasferimento radiativo utilizzati nel presente lavoro.

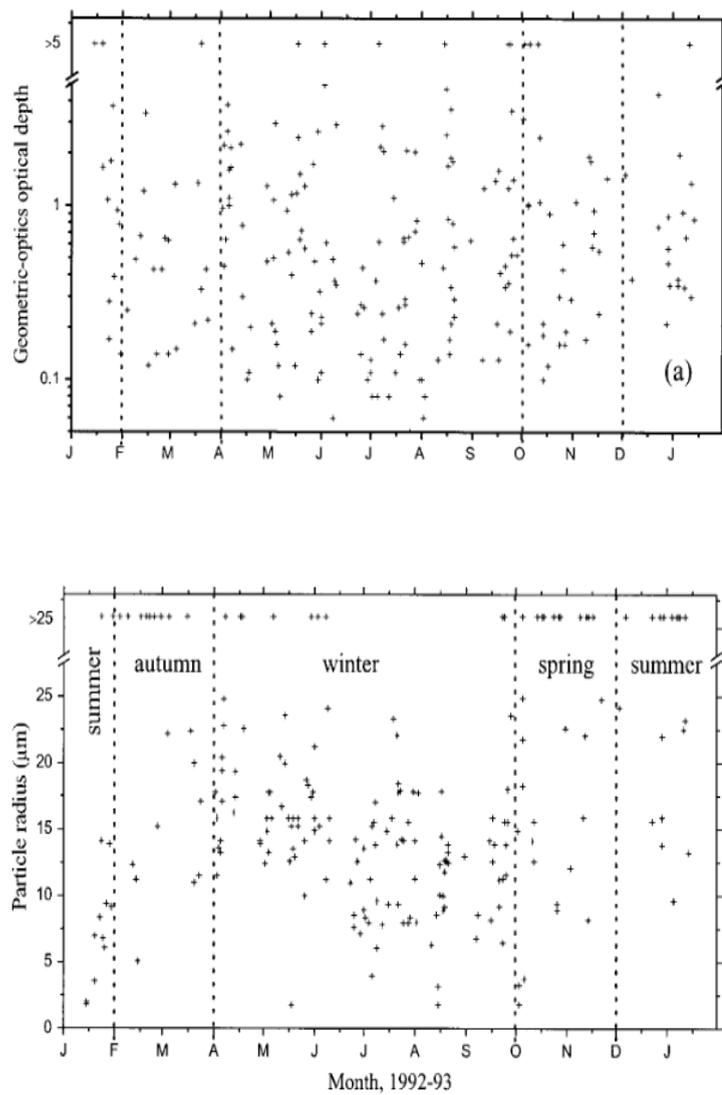


Figura 1.10: Risultati di un retrieval descritto in Mahesh et al., 2001, effettuato sulla base di dati raccolti nel 1992 presso la Base Amundsen-Scott tramite uno spettrometro a trasformata di Fourier con risoluzione di 1 cm^{-1} .

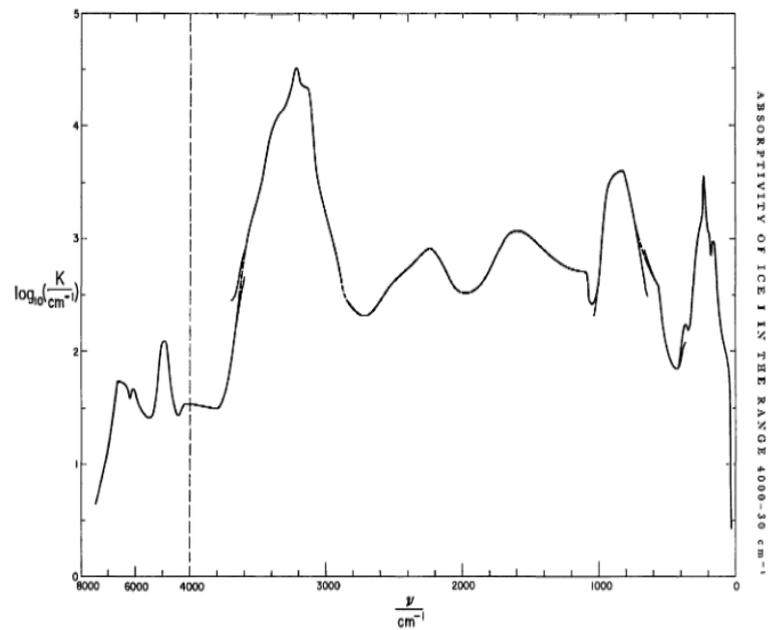


Figura 1.11: Logaritmo del coefficiente di assorbimento del ghiaccio I_h (quello più comune sulla Terra, caratterizzato da una struttura cristallina esagonale). Si noti il minimo nel lontano infrarosso, intorno ai 400 cm^{-1} , e il massimo intorno ai 900 cm^{-1} . Come sarà dimostrato più avanti in alcuni studi di sensibilità, nella regione spettrale attorno a questo minimo le proprietà di diffusione dei cristalli di ghiaccio contribuiscono in modo più significativo al segnale misurato da REFIR-PAD rispetto al segnale simulato nella finestra atmosferica. L'immagine è tratta dallo studio di Bertie et al., 1968

Sezione 2

Modelli

2.1 Introduzione

RFTS è uno spettrometro. In quanto tale, esso misura la potenza della radiazione elettromagnetica per unità di angolo solido, di superficie e di frequenza in un certo intervallo di lunghezze d'onda (l'unità misurata, nel sistema internazionale, è $\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{ sr cm}^{-1}}$). Tale quantità fisica, detta *radianza*, si origina tramite un'articolata sequenza di processi di *trasferimento radiativo*. I processi alla base del trasferimento radiativo sono determinati dall'*equazione di trasferimento radiativo*, che rappresenta la base di un qualsiasi *modello diretto*. Una forma dell'equazione di trasferimento radiativo valida per un'atmosfera piano-parallela, cioè in cui la curvatura terrestre è posta uguale a zero, è la seguente:

$$\mu \frac{dL(\mu, \phi, \chi)}{d\chi} = -L(\mu, \phi, \chi) + \frac{\tilde{\omega}}{4\pi} SP(\mu, \phi, \chi)e^{-\chi/\mu_0} + \epsilon B(T(\chi)) + \frac{\tilde{\omega}}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 L(\mu', \phi', \chi) P(\mu, \phi, \mu', \phi', \chi) d\mu' d\phi' \quad (2.1)$$

Ciascun termine dell'equazione 2.1 dipende implicitamente dal numero d'onda. Questo significa che per calcolare uno spettro è necessario risolvere l'equazione numerose volte, una per ciascun numero d'onda. Inoltre, questa equazione è valida esclusivamente per la radianza in *upwelling*, cioè diretta dalla superficie terrestre verso lo spazio. Le coordinate (μ, ϕ) rappresentano la direzione dove vengono effettuate le misure: $\mu = \cos(\theta)$ è il coseno dell'angolo zenitale, ovvero il coseno dell'angolo formato dalla verticale alla superficie e dalla semiretta passante per lo spettrometro, mentre ϕ è l'angolo zenitale. Questa configurazione è rappresentata in figura 2.1.

Data la complessità dell'equazione, vale la pena rappresentarla in modo alternativo per facilitarne la comprensione. Prima di tutto, raccogliamo gli ultimi tre termini a secondo membro in una singola funzione, detta *funzione sorgente*:

$$J(\mu, \phi, \chi) = \frac{\tilde{\omega}}{4\pi} SP(\mu, \phi, \chi)e^{-\chi/\mu_0} + \epsilon B(T(\chi)) + \frac{\tilde{\omega}}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 L(\mu', \phi', \chi) P(\mu, \phi, \mu', \phi', \chi) d\mu' d\phi'$$

Dopodiché, moltiplichiamo ambo i membri per $\frac{d\chi}{\mu}$. Otteniamo:

$$dL(\mu, \phi, \chi) = -\frac{L(\mu, \phi, \chi)}{\mu} d\chi + \frac{J(\mu, \phi, \chi)}{\mu} d\chi$$

Il significato dell'equazione appare ora più evidente. La variazione infinitesimale di radianza, rappresentata a primo membro, è uguale alla somma di due termini. Il primo, $-\frac{L(\mu, \phi, \chi)}{\mu} d\chi$, ha segno negativo ed è quindi un termine di attenuazione. Esso è proporzionale

alla radianza stessa moltiplicata per lo spessore ottico infinitesimale $d\chi = k_{att}\rho_{ass}dz$ di uno strato di atmosfera. Il termine al denominatore, $\mu = \cos(\theta)$, è un termine correttivo che indica l'aumento dello spessore ottico effettivo se la radiazione segue un percorso obliquo.

Il secondo termine, invece, ha segno positivo e rappresenta una produzione di radianza nello strato di atmosfera con spessore ottico $d\chi$. La funzione sorgente è composta dalla somma di tre addendi:

- Il primo, $\frac{\tilde{\omega}}{4\pi}SP(\mu, \phi, \chi)e^{-\chi/\mu_0}$, è un termine legato all'irradianza solare, dove $\tilde{\omega} = \frac{k_{scat}}{k_{qss}}$ è detto *albedo di scattering singolo*, S è l'irradianza solare al top dell'atmosfera, $P(\mu, \phi, \chi)$ è la funzione di fase dello strato di atmosfera corrispondente allo spessore ottico $\chi(z, z_{surf}) = \int_{z_{surf}}^z k_{att}\rho_{ass}dz$ e $\mu_0 = \cos(\theta_0)$ è il coseno dell'angolo zenitale del sole.
- Il secondo addendo, $\epsilon B(T(\chi))$, rappresenta l'emissione di corpo nero dello strato atmosferico corrispondente allo spessore ottico χ .
- Il terzo addendo, $\frac{\tilde{\omega}}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 L(\mu'\phi', \chi)P(\mu, \phi, \mu', \phi', \chi)d\mu'd\phi'$, è il cosiddetto termine di *scattering multiplo*. Esso quantifica la radianza già diffusa proveniente dalla direzione (μ', ϕ') che viene nuovamente diffusa nella direzione (μ, ϕ) , ossia in direzione dello strumento di misura.

La risoluzione dell'equazione di trasferimento radiativo è molto complessa. Per questo motivo è opportuno partire da un esempio semplice, dove si abbia $J(\mu, \phi, \chi) = 0$. L'equazione 2.1 può ora essere integrata facilmente. Si ottiene:

$$L(\mu, \chi) = L(\mu, \chi_0)e^{-\chi/\mu} \quad (2.2)$$

L'equazione 2.2 indica che il termine di attenuazione a secondo membro riduce la radianza secondo una legge esponenziale. L'equazione 2.2 è detta *legge di Lambert-Beer*.

Tramite l'equazione 2.2 è possibile definire il concetto di trasmissività. La trasmissività è infatti il rapporto tra la potenza emergente da un campione (nel nostro caso, da uno strato di atmosfera) e quella incidente iniziale. In altri termini:

$$\tau = \frac{L(\mu, \chi)}{L(\mu, 0)} = e^{-\chi/\mu} \quad (2.3)$$

Nonostante l'apparente semplicità dell'equazione 2.2, la determinazione della radianza $L(\mu, \chi)$ non è affatto banale neanche in questo caso. Per comprenderlo si farà un semplice esempio.

Si supponga che l'equazione 2.2 rappresenti la risoluzione di un semplice quanto irrealistico modello di trasferimento radiativo in atmosfera, dove la funzione sorgente sia uguale a zero. In questo modello, la radianza corrispondente allo spessore ottico χ_0 è uguale alla radianza emessa dalla superficie terrestre, ovvero $L(\mu, \chi_0) = \epsilon B(T_{surf})$, dove ϵ è l'emissività spettrale della superficie. In altri termini, si ha:

$$L(\mu, \chi) = \epsilon B(T_{surf})e^{-\chi/\mu} \quad (2.4)$$

In ultima analisi, l'equazione 2.4 descrive come la radiazione emessa dalla superficie terrestre viene assorbita dai gas atmosferici. Dato che l'equazione è già stata risolta nella variabile L , non resta che determinare le proprietà ottiche χ ed ϵ per ottenerne una risoluzione completa. Tale compito è tutt'altro che semplice. Vediamo perché.

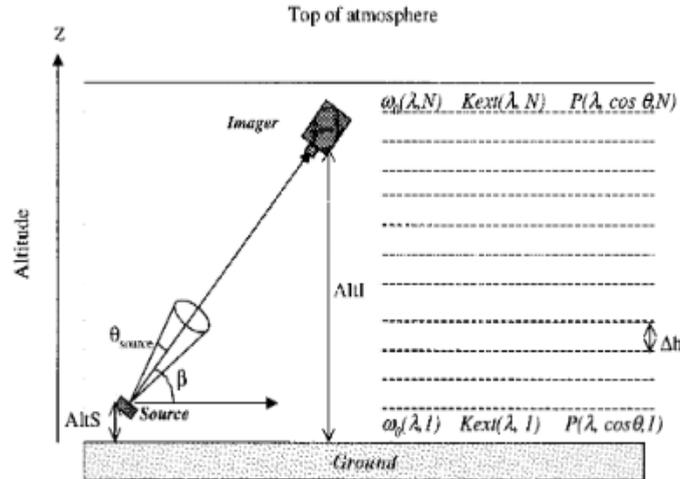


Figura 2.1: Rappresentazione di un'atmosfera piano parallela. È in questo contesto che l'equazione 2.1 descrive in modo ottimale il trasferimento radiativo in atmosfera. L'angolo β rappresentato è il complementare di θ , l'angolo zenitale. L'immagine è stata presa da Chervet et al, 2002.

2.2 Determinazione degli spessori ottici

Come si è già accennato, lo spessore ottico di uno strato di atmosfera è dato da un'equazione del tipo:

$$\chi = - \int_{z_0}^z k_{att} \rho dz \quad (2.5)$$

Dove k_{att} è il coefficiente di attenuazione delle specie chimiche presenti in atmosfera, misurato in kg/m^2 , mentre ρ è la densità di tali specie chimiche. Il coefficiente di attenuazione è dato dalla somma dei coefficienti di assorbimento e di diffusione:

$$k_{att} = k_{ass} + k_{diff}$$

Supponiamo di voler lavorare nell'infrarosso. È sensato assumere che $k_{att} = k_{ass}$, dato che l'effetto dello scattering di Rayleigh è trascurabile in questa porzione dello spettro. I ragionamenti che seguono si baseranno su questa assunzione.

I gas assorbitori presenti in atmosfera sono molto numerosi (abbiamo il vapore acqueo, il diossido di carbonio, il metano, l'ozono, gli ossidi di azoto, etc). Per calcolare lo spessore ottico totale, è necessario determinare gli spessori ottici di ciascun assorbitore e poi sommarli:

$$\chi = \chi_{H_2O} + \chi_{CO_2} + \chi_{CH_4} + \chi_{O_3} + \chi_{N_2O} \dots$$

Ricordiamo che il nostro obiettivo è misurare uno spettro la cui risoluzione sia quanto maggiore possibile: l'equazione 2.4 dovrà quindi essere risolta per un grande numero di numeri d'onda. Purtroppo, come si è già visto nella sezione 1.2, le proprietà di assorbimento dei gas mutano rapidamente con la lunghezza d'onda, e sono altamente dipendenti dalla struttura della molecola presa in considerazione.

Una volta nota la posizione nello spettro di ciascuna riga di assorbimento di ciascuna specie chimica assorbente, è necessario determinare il coefficiente di assorbimento di ciascuna riga e per ogni specie

chimica per completare il lavoro. Tale calcolo è molto complesso. Vediamo perché. Prendiamo come esempio la riga di assorbimento del vapore acqueo a $502.25642 \text{ cm}^{-1}$ e chiamiamola δ_{502} . Il coefficiente di assorbimento relativo ad essa può essere visto come il prodotto di due fattori:

$$k_{ass}(\delta_{502}, H_2O, P, T) = I(\delta_{502}, H_2O, T)F(\nu - 502.25642, \delta_{502}, H_2O, P, T) \quad (2.6)$$

Il primo fattore, $I(\delta_{502}, H_2O, T)$, determina l'intensità della riga di assorbimento, mentre il secondo, $F(\nu - 502.25642, \delta_{502}, H_2O, P, T)$, ne determina la forma. L'intensità della riga di assorbimento dipende dalla temperatura, mentre la sua forma dipende sia dalla temperatura che dalla pressione.

2.2.1 Intensità di riga

In condizioni di equilibrio termodinamico locale (o LTE, *local thermodynamic equilibrium*), tipicamente presenti in troposfera e in stratosfera, l'intensità di una riga di assorbimento e di emissione si calcolano tramite i *coefficienti di Einstein*. Essi misurano la probabilità per unità di tempo e per unità di densità di energia spettrale che avvenga un'emissione indotta (coefficiente B_{21}) o un assorbimento (coefficiente B_{12}). La formula è la seguente:

$$I(\delta_{502}, H_2O, T) = \frac{h\nu}{4\pi}(n_1B_{12} - n_2B_{21}) \quad (2.7)$$

dove n_1 e n_2 sono le popolazioni delle molecole nello stato meno energetico e nello stato più energetico della transizione, rispettivamente (per approfondire questi concetti, si faccia riferimento a un buon manuale di spettroscopia). Tali popolazioni sono determinate dalla distribuzione di Boltzmann, la quale è a sua volta legata alla temperatura.

2.2.2 Forma di riga

La funzione che determina la forma, $F(\nu - 502.25642, \delta_{502}, H_2O, P, T)$, è detta *profilo di Voigt*. Tale profilo dà alla riga spettrale una sua larghezza caratteristica intrinseca, che non può essere ridotta tramite una maggiore risoluzione dello strumento. Il profilo di Voigt nasce da due processi di allargamento delle righe spettrali, noti come *allargamento Doppler* e *allargamento collisionale*. I due effetti saranno trattati separatamente.

Allargamento Doppler

L'allargamento Doppler è dovuto al fatto che, nei gas, le velocità delle particelle non sono tutte uguali, bensì seguono la distribuzione delle velocità di Maxwell:

$$P_v(v)dv = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv \quad (2.8)$$

dove m è la massa delle molecole. La variabilità delle velocità all'interno del gas comporta uno spostamento verso il rosso o verso il blu della frequenza dei fotoni emessi o assorbiti. Più precisamente, la velocità della molecola v_p è legata alla frequenza osservata e alla frequenza a riposo tramite la formula:

$$v_p = c\left(\frac{\nu}{\nu_0} - 1\right)$$

Dove ν_0 è la frequenza a riposo e ν è la frequenza osservata. Nel nostro esempio, ν_0 è pari a $502.25642 \text{ cm}^{-1}$. Sostituendo il risultato nell'equazione 2.8, si ottiene:

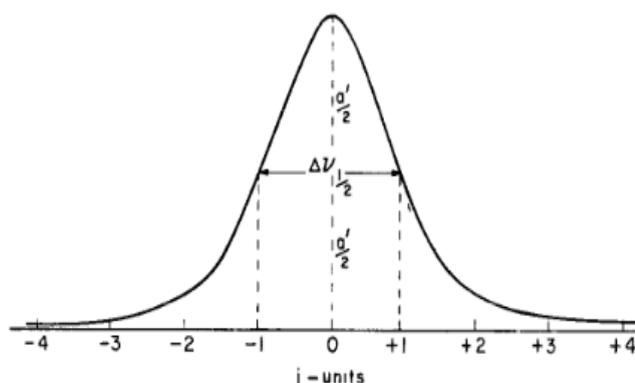


Figura 2.2: Larghezza a metà altezza di un profilo di riga gaussiano. L'asse delle ascisse è rappresentato in *unità j*, ossia multipli della larghezza a metà altezza. L'immagine è stata presa da Seshandri e Jones, 1962.

$$F_{dopp} = \sqrt{\frac{mc^2}{2\pi kT\nu_0^2}} e^{-\frac{mc^2(\nu-\nu_0)^2}{2kT\nu_0^2}} \quad (2.9)$$

L'equazione 2.9 ci mostra come la distribuzione delle velocità di Maxwell crei un profilo di riga di tipo gaussiano. A questo punto, è legittimo domandarsi come possa essere quantificato l'allargamento della riga spettrale, per stimare l'influenza dell'effetto Doppler negli spettri che misuriamo. Esistono almeno due modi per determinare la larghezza della riga. Il primo, a cui gli statistici sono più usi, è il doppio della deviazione standard della funzione gaussiana, ovvero:

$$\sigma_{dopp} = 2\sqrt{\frac{kT}{mc^2}}\nu_0$$

Un altro modo, ovvero quello normalmente adoperato in spettroscopia, è il calcolo della larghezza a metà altezza (o FWHM, *full width at half maximum*). Essa si calcola determinando le due frequenze corrispondenti a un valore di intensità pari a metà di quello massimo e calcolando la differenza tra di loro. Per il profilo Doppler, essa è pari a:

$$FWHM_{dopp} = \sqrt{\frac{8 \ln 2 kT}{mc^2}}\nu_0 \approx 1.23 \cdot 10^{-7} \sqrt{T}\nu_0 \approx 2 \cdot 10^{-6} \nu_0$$

In entrambi i casi, appare evidente che l'allargamento Doppler è proporzionale alla frequenza centrale della riga, ν_0 , ed è dunque più importante nel visibile che non nell'infrarosso. Esso è proporzionale anche alla radice quadrata della temperatura del gas, ma tale fattore incide relativamente poco, dato che la temperatura di atmosfera non varia nemmeno di un ordine di grandezza (si va dai 190 K della tropopausa tropicale ai 340 K delle superfici più calde).

Allargamento collisionale

L'allargamento collisionale, invece, è dovuto a un allargamento dei livelli atomici causato dalla vicinanza tra le particelle in un gas a elevata densità. La derivazione del profilo di riga è piuttosto complessa:

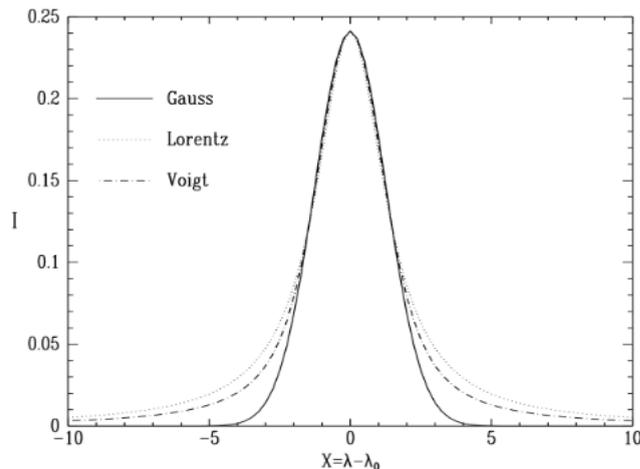


Figura 2.3: Tre forme di riga a confronto. Il profilo gaussiano è dato dall'allargamento Doppler, il profilo lorentziano è dato dall'allargamento collisionale, mentre il profilo di Voigt si ottiene tramite la convoluzione dei due profili. L'immagine è stata presa da Di Rocco e Cruzado, 2011.

per una descrizione dettagliata, si rimanda a un testo dedicato ([7, pag. 369]). La dimostrazione non necessita di concetti di meccanica quantistica. Essa si basa sul fatto che il treno d'onda di cui è composto il fotone viene emesso indisturbato da una molecola di gas finché non avviene un urto con un'altra molecola, che lo interrompe bruscamente. Da questa interruzione deriva uno spettro di potenza dipendente dall'intervallo di tempo intercorso tra l'inizio dell'emissione e la collisione:

$$Pot_{singolo\ urto}(\nu, \nu_0) = K \frac{\sin^2\left(\frac{\pi t_{urto}}{2} c[\nu - \nu_0]\right)}{\left(\frac{c[\nu - \nu_0]}{2}\right)^2}$$

dove t_{urto} è l'intervallo di tempo succitato, e ν_0 è la frequenza centrale della riga (nel nostro esempio, è pari a 502.25642 cm^{-1}), e K è una costante. Questo spettro di potenza è dovuto a un singolo urto. Per raggiungere il risultato finale è necessario effettuare una media pesata sulla totalità degli intervalli di tempo possibili, dove il peso deve corrispondere alla probabilità che un urto avvenga dopo un certo intervallo di tempo. La distribuzione degli urti nel tempo risulta avere un profilo poissoniano, $P(t) = \frac{1}{T_0} e^{-\frac{t}{T_0}}$, dove T_0 è la frequenza caratteristica degli urti. L'operazione di media pesata può essere effettuata tramite un integrale, da cui si ottiene:

$$Pot(\nu, \nu_0) = \int_0^\infty Pot_{singolo\ urto}(\nu, t) P(t) dt = \frac{K}{\pi T_0} \frac{c}{c^2(\nu - \nu_0)^2 + \left(\frac{1}{\pi T_0}\right)^2}$$

Da tale formula si deduce che il profilo derivato dall'allargamento collisionale è di tipo lorentziano, ovvero:

$$F_{coll}(\nu, \nu_0, P, T) = \frac{c}{\pi T_0} \frac{1}{c^2(\nu - \nu_0)^2 + \left(\frac{1}{\pi T_0}\right)^2} \quad (2.10)$$

La FWHM di questa forma di riga è pari a:

$$FWHM_{coll} = \frac{2c}{\pi T_0}$$

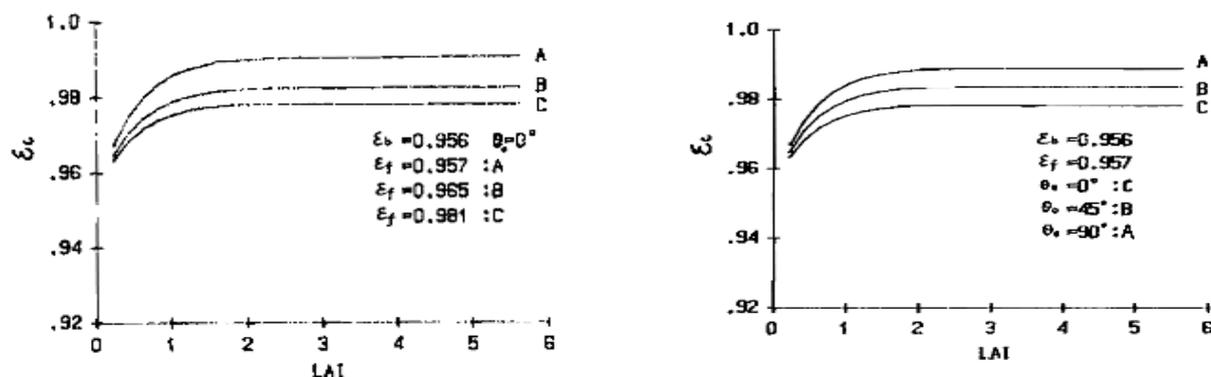


Figura 2.4: Dipendenza dell'emissività della chioma degli alberi dal *leaf area index*. Nel pannello a sinistra, è evidenziata la dipendenza dall'emissività delle singole foglie. Nel pannello a destra, è evidenziata la dipendenza dall'angolo di inclinazione delle foglie. Le immagini sono state prese da Guoquan et al, 1992.

Essa è dunque proporzionale alla frequenza delle collisioni. Tale frequenza, a sua volta, è legata alla pressione e alla temperatura tramite la legge dei gas perfetti:

$$\frac{1}{t_0} \propto \frac{P}{\sqrt{T}}$$

Utilizzando la stessa legge, si può stimare la FWHM di una riga spettrale tramite la seguente formula.

$$FWHM_{coll} \approx 1.7 \frac{P}{P_0 \sqrt{T}} \text{ cm}^{-1} \approx 0.1 \frac{P}{P_0} \text{ cm}^{-1} \quad (2.11)$$

Dove P_0 è la pressione alla superficie (circa 101 300 Pa). L'allargamento collisionale è dunque tanto più evidente quanto maggiore è la pressione. In atmosfera, la pressione ha un profilo esponenziale. Per questo motivo, l'importanza dell'allargamento collisionale diminuisce rapidamente con la quota. Comparando le approssimazioni della FWHM collisionale e di quella Doppler, si nota come alla superficie (dove $P = P_0$) esse si uguagliano solo per un numero d'onda di circa $50\,000 \text{ cm}^{-1}$ (corrispondente a una lunghezza d'onda in micron pari a $\lambda = 0.2\mu$). Questo significa che alla superficie, e in generale in bassa troposfera, l'allargamento collisionale è molto più importante dell'allargamento Doppler nella determinazione dei profili di riga nel visibile e in tutto l'infrarosso. Salendo di quota, le cose cambiano rapidamente.

Ogni 5500 m circa la pressione si dimezza. In stratosfera, a una quota di circa 33 km, si trova che l'allargamento collisionale ha un effetto simile all'allargamento Doppler a una frequenza di circa 780 cm^{-1} (equivalente a una lunghezza d'onda in micron pari a $\lambda = 12.8\mu$). Ciò significa che a questa quota la radiazione visibile ($13\,000 \text{ cm}^{-1} \leq \nu \leq 26\,000 \text{ cm}^{-1}$) e gran parte del vicino infrarosso ($\nu \geq 660 \text{ cm}^{-1}$) hanno dei profili di riga determinati in massima parte dall'allargamento Doppler.

Profilo di Voigt

In generale, l'allargamento Doppler e l'allargamento collisionale possono contribuire entrambi in maniera significativa alla determinazione del profilo di riga. Per questo motivo vale la pena calcolarne sempre l'effetto combinato, operando la *convoluzione* dei due profili, ottenendo il cosiddetto *profilo di Voigt*:

$$F_{voigt}(\nu, \nu_0, P, T) = \int_{-\infty}^{\infty} F_{coll}(\nu', \nu_0, P, T) F_{dopp}(\nu - \nu', \nu_0, T) d\nu' \quad (2.12)$$

La FWHM del profilo di Voigt, a causa della natura implicita della funzione che lo definisce, non può essere determinato come funzione elementare delle FWHM degli effetti Doppler e collisionale. Si possono tuttavia fare delle approssimazioni. Una approssimazione con errore relativo molto basso (che non supera lo 0,2%) è la seguente ([8, pag. 233-236]):

$$FWHM_{voigt} \approx 0.5346 FWHM_{coll} \sqrt{0.2166 FWHM_{coll}^2 + FWHM_{dopp}^2} \quad (2.13)$$

L'equazione 2.13 evidenzia come la larghezza delle righe dipenda più fortemente dall'effetto collisionale che non dall'effetto Doppler. Questo è dovuto al fatto che il peso delle code in una distribuzione lorentziana è maggiore rispetto al peso delle code in una distribuzione gaussiana. È importante notare come alcune righe non seguono un profilo di Voigt, come quelle della banda rotazionale del vapore acqueo tra i 200 e i 350 cm^{-1} . La causa di questo fatto risiede nelle imprecisioni dei modelli, specialmente per quanto riguarda l'allargamento collisionale. Infatti, nell'aria sono presenti molti gas, ciascuno con certe proprietà elettromagnetiche. Una collisione tra due molecole di diverso tipo (che causa il cosiddetto *foreign-gas broadening*) produce un allargamento diverso rispetto a una collisione tra due molecole identiche (che causa invece il *self-broadening*). Per creare un modello realistico occorre tenere conto di questi fatti.

Prima di proseguire, riassumiamo quanto detto finora. Nonostante sia talvolta possibile risolvere analiticamente l'equazione di trasferimento radiativo, la determinazione delle proprietà ottiche χ ed ϵ è tutt'altro che lineare.

Per quanto riguarda lo spessore ottico χ , è necessario prima di tutto disporre di un database affidabile e aggiornato che indichi la posizione, l'intensità e la forma di ciascuna riga spettrale di interesse in atmosfera, nonché la dipendenza delle caratteristiche di ciascuna di queste righe da variabili termodinamiche come pressione e temperatura. Questo ci permetterà di determinare i coefficienti di assorbimento. Per ottenere gli spessori ottici sarà infine necessario integrare lungo la verticale i coefficienti di assorbimento moltiplicati per la densità degli assorbitori (equazione 2.4). Questo significa che è necessario conoscere la temperatura, la pressione e la densità dei singoli assorbitori a tutte le quote atmosferiche per determinare gli spessori ottici.

La determinazione dell'emissività della superficie, ϵ , può essere altrettanto complessa, sebbene la teoria che la determina sia molto diversa e riguardi soprattutto l'ottica geometrica e non fenomeni microscopici come nel caso dei gas. Si prenda come esempio l'emissività della chioma degli alberi, assai importante per il remote sensing in aree altamente vegetate. Essa è determinata da una complessa funzione del LAI (*leaf area index*, rapporto tra la superficie di foglie in un'area di terreno e la superficie di tale terreno), dell'emissività e dell'angolo di inclinazione di ciascuna di esse (Dong Guoquan e Li Zhengzhi, 1992).

In un modello diretto di trasferimento radiativo la determinazione degli spessori ottici rappresenta la prima fase essenziale per calcolare gli spettri. Nel presente lavoro di tesi, per effettuare questa operazione, è stato usato LbLRTM. Si tratta di un programma rapido e affidabile, che dispone anche di un modello per il continuo del vapore acqueo il cui ultimo aggiornamento (effettuato nel novembre 2016) è basato sulle analisi delle misure di REFIR-PAD presso Cerro Toco (Bianchini e Palchetti, 2008).

2.3 Integrazione dell'equazione di trasferimento radiativo

Una volta nota la funzione $\chi(\nu, z)$ per tutte le lunghezze d'onda d'interesse, è possibile integrare l'equazione 2.1. Chiaramente, l'integrazione di tale equazione è numerica: non esistono soluzioni sotto forma di funzioni elementari. Per arrivare a descriverne la soluzione è necessario fare alcune assunzioni. Prima di tutto, è importante evidenziare che per risolvere l'equazione 2.1 nell'infrarosso è possibile trascurare il termine legato all'irradianza solare, sia in presenza che in assenza di nubi.

2.3.1 Risoluzione in condizioni di cielo sereno

Per quanto riguarda il trasferimento in cielo sereno, è necessario tener conto della presenza dei soli gas. In tale caso, è possibile trascurare il termine di *scattering multiplo*, perché lo scattering di Rayleigh è molto inefficiente nell'infrarosso. Infatti, la sezione d'urto di diffusione dell'azoto σ_{diff} alla lunghezza d'onda di $10 \mu\text{m}$ è pari a circa $3.2 \cdot 10^{-36} \text{m}^2$. Sappiamo che in un m^3 d'aria, alla superficie, sono presenti circa $N = 2.4 \cdot 10^{25}$ molecole. Tramite questi dati è possibile calcolare lo spessore ottico caratteristico di diffusione dell'azoto nell'atmosfera terrestre. Supponendo che l'estensione dell'atmosfera sia di 80000 metri, otteniamo:

$$\chi_{car} = \int_0^{80000} N \sigma_{diff} \rho_{N_2} dz \approx 1.2 \int_0^{80000} N \sigma_{diff} e^{-\frac{z}{H}} dz = 7.6 \cdot 10^{-6}$$

Secondo il criterio di Bayvel e Jones (1981), lo spessore ottico caratteristico χ_{car} deve essere inferiore a 0.1 affinché lo scattering multiplo sia trascurabile [13, pag. 150]. Nel caso dei gas atmosferici, come testimoniano i calcoli appena effettuati, è perfettamente legittimo trascurarlo.

Le due semplificazioni introdotte sopra permettono la riscrittura dell'equazione di trasferimento radiativo come segue:

$$\mu \frac{dL_{gas}(\mu, \phi, \chi)}{d\chi} = -L_{gas}(\mu, \phi, \chi) + \epsilon B(T(\chi))$$

Tale equazione è detta *equazione di Schwartzchild*, la cui soluzione è analitica:

$$L_{gas}(\mu, \phi, z) = \epsilon_{surf} B(T_{surf}) \tau_{gas}(0, z) + \int_0^z B(T(z')) \frac{\partial \tau_{gas}(0, z')}{\partial z'} dz' \quad (2.14)$$

Dove $\tau_{gas}(0, z') = e^{-(\chi(z') - \chi_{surf})/\mu}$ è la trasmittività del gas calcolata tra la superficie e il livello atmosferico z' .

2.3.2 Risoluzione nel caso generale

Una volta risolta l'equazione in condizioni di cielo sereno, è possibile ottenere anche la risoluzione in condizioni di cielo nuvoloso o comunque in presenza di scattering multiplo. Data la soluzione analitica 2.14, è possibile sfruttare una scorciatoia per velocizzare la risoluzione dell'equazione di trasferimento radiativo alla risoluzione dello spettrometro RFTS.

Prima di tutto, dato che l'equazione 2.1 è lineare in $L(\mu, \phi, \chi)$, la soluzione può essere scomposta in due addendi, uno legato ai gas (già descritto tramite l'equazione 2.14) e uno legato alle nubi:

$$L(\mu, \phi, \chi) = L_{gas}(\mu, \phi, \chi) + L_{nube}(\mu, \phi, \chi)$$

Il primo addendo, quello legato ai gas, ha una forte dipendenza dalla lunghezza d'onda. Per questo motivo, i modelli che calcolano gli spessori ottici dei gas operano a grandi risoluzioni spettrali, fino a 0.0001 cm^{-1} , in modo tale che ciascuna riga spettrale sia rappresentata correttamente. Per degradare la risoluzione del modello a quella dello strumento (che per il RFTS del progetto FORUM è stata fissata a 0.3 cm^{-1}) è necessario operare la convoluzione tra le radianze simulate e la ILS (*instrumental line shape*). Tuttavia, calcolare le radianze per ciascuna lunghezza d'onda in uno spettro di 1500 cm^{-1} di ampiezza a una risoluzione media di 0.0001 cm^{-1} è eccessivamente gravoso dal punto di vista computazionale. Per ovviare al problema, si sfrutta la linearità dell'equazione 2.14. Infatti, grazie a questa proprietà, effettuare la convoluzione delle radianze $L_{gas}(\mu, \phi, \chi)$ con la ILS equivale a effettuare la convoluzione delle trasmissività con la ILS. Effettuare la convoluzione della radianza dovuta alle nubi $L_{nube}(\mu, \phi, \chi)$ con la ILS non produce mutamenti apprezzabili della radianza simulata, perché il contributo alla radianza dovuto alla nube varia debolmente con la lunghezza d'onda.

In sintesi, si ha:

$$\begin{aligned} L * ILS(\nu) &= L_{gas}(\tau_{gas}) * ILS(\nu) + L_{nube} * ILS(\nu) \\ L * ILS(\nu) &= L_{gas}(\tau_{gas} * ILS(\nu)) + L_{nube} \end{aligned}$$

In altri termini, è possibile anticipare la convoluzione con la funzione strumentale alla fase intermedia tra il calcolo degli spessori ottici e il calcolo delle radianze, almeno quando si opera nell'infrarosso. In questo modo sarà necessario integrare per un numero di lunghezze d'onda nettamente inferiore, se la risoluzione dello strumento è relativamente bassa. Questa procedura è stata seguita anche nel presente lavoro.

Descriviamo ora come integrare l'equazione di trasferimento radiativo. Per semplificare i risultati, si assumerà che i cristalli di ghiaccio presenti all'interno delle nuvole (unici elementi in grado di produrre una diffusione significativa nell'infrarosso) siano orientati in modo casuale. Questa assunzione implica che la funzione di fase dipenda solo da un angolo, l'*angolo di scattering* $\eta = \cos(\psi)$:

$$P(\mu, \phi, \mu', \phi') = P(\eta)$$

Dato che l'angolo di scattering è una funzione non periodica dell'intervallo chiuso $[-1, 1]$, essa può essere rappresentata tramite *polinomi di Legendre* tramite il *teorema di addizione*:

$$P(\eta) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=i}^M \omega_{i,j} P_i^j(\mu) P_i^j(\mu') \cos(j[\phi - \phi']) \quad (2.15)$$

Dove $\omega_{i,j}$ sono dei coefficienti che dipendono dalla geometria della distribuzione di cristalli di cui si vuole descrivere la funzione di fase, mentre le funzioni $P_i^j(\mu)$ sono i polinomi di Legendre relativi alla funzione di fase, descritti dalle seguenti equazioni:

$$\begin{aligned} P_i^0(\mu) &= \frac{1}{2^i i!} \frac{d^i(\mu^2 - 1)^i}{d\mu^i} \\ P_i^j(\mu) &= (1 - \mu^2)^{\frac{j}{2}} \frac{d^j P_i^0(\mu)}{d\mu^j} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Dato che i polinomi di Legendre sono noti, sviluppare la funzione di fase tramite una serie in polinomi di Legendre è un importante passo in avanti per l'integrazione del termine di scattering multiplo dell'equazione di trasferimento radiativo. Questa scomposizione è prodromica a entrambi i metodi risolutivi comunemente utilizzati, ovvero il *metodo delle ordinate discrete* e il *doubling and adding*.

2.3.3 Metodo delle ordinate discrete

Prima di tutto, descriviamo a grandi linee il metodo delle ordinate discrete. Esso è concettualmente semplice, e consiste nella trasformazione dell'equazione di trasferimento radiativo nel seguente sistema di n equazioni:

$$L(\mu, \phi, \chi) = \sum_{i=0}^n L_i(\chi, \mu) \cos(m[\phi_0 - \phi])$$

$$\mu_j \frac{dL_i(\mu_j, \chi)}{d\chi} = L_i(\mu_j, \chi) - J_i(\mu_j, \chi) \quad i = 0, \dots, n \quad j = -n, \dots, n \quad (2.17)$$

In pratica, la radianza viene prima espansa in serie di Fourier nella variabile angolo azimutale, e viene poi trasformata in una funzione $\mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$ nella variabile angolo zenitale. In questo modo, l'integrale che descrive lo scattering multiplo può essere trasformato in una sommatoria:

$$\begin{aligned} & \frac{\tilde{\omega}}{2} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 L(\mu', \phi', \chi) P(\mu, \phi, \mu', \phi', \chi) d\mu' d\phi' \\ &= \frac{\tilde{\omega}}{2} \sum_{j=0}^n \omega_{j,0} P_k^0(\mu_j) \sum_{k=-n}^n c_k L_i(\mu_k, \chi) P_i^0(\mu_k, \chi) \\ &= \frac{\tilde{\omega}}{2} \sum_{k=-n}^n c_k L_i(\chi, \mu_k) P(\mu, \mu') \end{aligned}$$

L'ultima uguaglianza segue dal *teorema di addizione* per i polinomi di Legendre (equazione 2.15 per $m = 0$). I coefficienti c_k sono detti *pesi* e dipendono *solo* dal metodo di quadratura utilizzato per integrare la funzione $L_i(\mu) P_i^0(\mu, \chi)$ nella variabile angolo zenitale. Si tratta quindi di coefficienti noti. La risoluzione dell'equazione di trasferimento radiativo adesso può essere completata, perché con la trasformazione dell'integrale dello scattering multiplo in una sommatoria abbiamo ottenuto un sistema di equazioni differenziali lineari, le cui soluzioni sono le somme di n funzioni esponenziali complesse. Tale sistema può essere scritto come segue:

$$\mu_j \frac{dL_i(\mu_j, \chi)}{d\chi} = -L_i(\mu_j, \chi) + \epsilon B(T(\chi)) + \frac{\tilde{\omega}}{2} \sum_{k=-n}^n c_k L_i(\mu_k, \chi) P(\mu_j, \mu_k) \quad (2.18)$$

$$i = 0, \dots, m \quad j = -n, \dots, n$$

Dove gli indici i rappresentano i termini della serie di Fourier in cui è sviluppata la soluzione $L(\mu, \phi, \chi)$, gli indici j rappresentano i punti in cui si è scelto di calcolare gli angoli zenitali (le *ordinate discrete* μ_j) e gli indici k sono utilizzati per calcolare l'integrale dello scattering multiplo, e percorrono tutte le ordinate discrete da $-n$ a n . Bisogna essere molto cauti nella scelta del numero n di coordinate discrete da utilizzare, e di conseguenza dell'ordine $p = 2n$ della quadratura. Se si sceglie il metodo di quadratura di Gauss, per esempio, la sommatoria che sostituisce l'integrale restituirà un risultato perfetto se l'integrando è un polinomio di grado $2p - 1 = 4n - 1$ o inferiore. Questo significa che il numero di polinomi di Legendre utilizzati per rappresentare la funzione di fase e la precisione della quadratura sono strettamente legati. Come si è già accennato nella sezione 1.4, sono necessari più dei 16 polinomi di Legendre utilizzati comunemente per i modelli di trasferimento radiativo nell'infrarosso se si vuole ottenere una precisione adeguata nella risoluzione delle equazioni. Lo stesso ragionamento vale anche per il metodo *adding and doubling*, perché anche utilizzando quest'ultimo sarà necessario espandere la funzione di fase in polinomi di Legendre ed effettuare la quadratura dell'integrale che descrive lo scattering multiplo.

Un programma molto diffuso che fa uso del metodo delle ordinate discrete è DISORT (Discrete Ordinates Radiative Transfer Program for a Multi-Layered Plane-Parallel Medium). DISORT è stato scritto quasi 30 anni or sono (Stamnes et al, 1988) ed è utilizzato in numerosi codici per il calcolo del trasferimento radiativo, tra cui il programma GBB che il sottoscritto ha ricevuto dai ricercatori del CNR per fare alcune simulazioni di prova.

2.3.4 Adding and doubling

È possibile utilizzare anche un altro metodo per integrare l'equazione 2.1: l'*adding and doubling*. Esso prevede, in sostanza, la discretizzazione della funzione $L(\mu, \phi, \chi)$ nella coordinata χ . La procedura, per sommi capi, è la seguente:

- Si divide l'atmosfera in un certo numero di strati, ciascuno dei quali è caratterizzato da un valore di quota geometrica, di temperatura, di pressione, di spessore ottico e da una certa funzione di fase. In genere, in un modello diretto, si divide l'atmosfera in parecchie decine di strati. Nell'infrarosso, la funzione di fase è quella dei cristalli di ghiaccio o delle goccioline d'acqua che compongono le nubi.
- Ciascuno strato viene diviso in un grande numero di straterelli otticamente molto sottili ($\Delta\chi \approx 10^{-8}$) che discretizzano l'atmosfera nella coordinata χ .
- Si calcolano le proprietà ottiche degli straterelli ottenuti. Tali proprietà ottiche sono la trasmittività efficace e la riflettività efficace, definite come operatori lineari agenti sulla radianza. Ad esempio, la trasmittività efficace per uno strato di spessore ottico χ_1 adiacente alla superficie illuminato da sotto è definita dalla seguente equazione:

$$L(\chi_1, \mu, \phi) = T L(0, \mu, \phi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 T * (\mu, \phi, \mu', \phi') L(0, \mu', \phi') \mu' d\mu' d\phi' \quad (2.19)$$

Dove $T*$ è l'operatore lineare che descrive la trasmittività efficace per uno strato illuminato da sotto. Nell'equazione 2.19 si assume che lo spessore ottico sia una funzione crescente con la quota, pari a 0 sulla superficie.

- Per uno strato di spessore ottico molto piccolo vale l'approssimazione di scattering singolo. Tramite tale approssimazione, è possibile scrivere gli operatori di trasmittività e riflettività tramite la funzione di fase. Per la trasmittività efficace per uno strato illuminato da sotto si ha:

$$T(\mu, \phi, \mu', \phi') = \frac{\tilde{\omega}}{4\mu\mu'} P(\mu, \phi, \mu', \phi') \chi_1$$

- Per descrivere le proprietà ottiche di uno strato intero si applicano dei semplici ragionamenti di ottica geometrica. Si utilizzano le trasmittività e le riflettività degli straterelli otticamente sottili, che si assumono essere identiche per ciascuno straterello all'interno di uno stesso strato, ottenendo delle proprietà ottiche composte. Tali proprietà ottiche composte possono descrivere anche lo scattering multiplo. Calcolarle richiede ancora una volta lo sviluppo della funzione di fase in polinomi di Legendre e un metodo di quadratura.
- Una volta note le trasmittività e le riflettività di ciascuno strato che compone l'atmosfera, si può determinare la radianza che misurerebbe uno strumento posto nella direzione (μ, ϕ) .

Il metodo *adding and doubling* è presente all'interno del modello diretto utilizzato per fare la maggior parte delle simulazioni descritte nel presente lavoro, ossia RT3.

Finora sono stati descritti i metodi che i modelli diretti utilizzano per integrare l'equazione di trasferimento radiativo. Nei prossimi paragrafi saranno descritti in maggiore dettaglio i modelli diretti utilizzati nel presente lavoro.

2.4 Modelli diretti e modelli inversi

Prima di cominciare, è necessario fare un'importante distinzione. Esistono due classi di modelli: i *modelli diretti* e i *modelli inversi*. I primi determinano gli spettri che uno strumento misurerebbe con una certa geometria di osservazione e in presenza di un certo sistema Terra-atmosfera. I secondi, al contrario, deducono la composizione, le proprietà ottiche e le proprietà termodinamiche del sistema Terra-atmosfera operando sugli spettri misurati da o simulati per uno strumento. I modelli diretti vengono generalmente utilizzati congiuntamente a misure di spettri veri e propri. I confronti che scaturiscono tra gli spettri misurati e simulati possono portare a comprendere le debolezze del modello diretto. I modelli inversi, invece, vengono generalmente utilizzati per stimare le proprietà del sistema Terra-atmosfera analizzando gli spettri misurati da un qualche strumento.

Mentre i modelli diretti sono deterministici e determinate condizioni iniziali possono portare a un solo risultato finale, i modelli inversi sono costretti a risolvere un problema mal posto. Facciamo un esempio per meglio comprendere questo concetto. Supponiamo di avere uno strumento in orbita che osservi la Terra con una geometria al nadir in prossimità della Sicilia. Supponiamo che il nostro strumento abbia una risoluzione infinita e non sia affetto da alcun errore di misura e che operi nelle lunghezze d'onda comprese tra 660 e 1600 cm^{-1} . È chiaro che il sistema Terra-atmosfera sottostante potrà produrre esclusivamente lo spettro osservato dallo strumento. Tuttavia, è possibile che più di un sistema Terra-atmosfera produca lo spettro che osserviamo: un sistema Terra-atmosfera in cielo sereno e con temperatura superficiale di 300 K potrebbe produrre uno spettro identico a quello dato da sistema Terra-atmosfera con cielo coperto da un cirro sottile e con temperatura superficiale di 303 K. Il problema è dunque mal posto: esistono infinite soluzioni per il problema inverso, anche se gli errori sono uguali a zero. Ciò che si può fare, quindi, è trovare la soluzione più *ragionevole*, o comunque *fisicamente più accettabile*. Ad esempio, una soluzione del modello inverso che preveda una temperatura oscillante tra i 100 e i 400 K salendo di quota non ha basi fisiche, e dovrà dunque essere scartata. In generale, si cerca di minimizzare la variabile statistica χ^2 , definita come:

$$\chi^2 = (v - v_t)^\top E^{-1}(v - v_t) + X^\top K X$$

Dove v è lo spettro misurato, mentre v_t è lo spettro che si ottiene applicando il modello diretto alle variabili atmosferiche ricavate tramite modello inverso. I due valori non coincidono a causa delle limitazioni che affliggono entrambi i modelli. E è la matrice di covarianza, mentre X è una matrice $m \times q$ che include tutte le m variabili atmosferiche misurate nelle q quote dove si vuole effettuare il retrieval. K , infine, è la matrice delle varianze e covarianze climatologiche delle variabili atmosferiche. Il modello inverso si propone di minimizzare la variabile statistica χ^2 , ovvero di minimizzare la differenza tra i valori di radianza misurati v e i valori teorici v_t , tenendo conto anche dei profili climatologici, considerati i più probabili.

Nel presente lavoro non si sono mai utilizzati modelli inversi. Nonostante lo scopo precipuo della tesi fosse la realizzazione di un codice che classificasse le nubi secondo le loro caratteristiche microfisiche,

le tecniche utilizzate sono state di tipo puramente statistico: la classificazione non ha mai richiesto l'inversione del modello diretto. Per quanto riguarda i modelli diretti, invece, ne sono stati utilizzati tre. Il primo, LbLRTM, è stato utilizzato per calcolare gli spessori ottici dei gas in atmosfera. Il secondo, RT3, è stato utilizzato per calcolare gli spettri a partire dagli spessori ottici calcolati da LbLRTM, opportunamente rielaborati. Il terzo, GBB, è stato utilizzato per fare delle simulazioni di prova e per acquisire consapevolezza per quanto riguarda il funzionamento dei codici in fortran. GBB è stato preso in considerazione poiché è in grado di effettuare le operazioni di LbLRTM e di RT3 messi insieme. Si è tuttavia preferito l'utilizzo dei primi due modelli, per varie ragioni. Anzitutto, la versione di GBB di cui dispongo è stata concepita per calcolare radianze per strumenti con risoluzione molto elevata e con una geometria al lembo. Per questo motivo, al modello mancano funzionalità necessarie alla realizzazione degli obiettivi di questo lavoro, come la possibilità di inserire una superficie o di effettuare la convoluzione delle trasmissività con la ILS. Nonostante il sottoscritto abbia lavorato sul codice e abbia inserito con successo entrambe queste funzionalità, il recente aggiornamento di LbLRTM nella banda rotazionale del vapore acqueo mi ha indotto a ritenere più opportuno l'uso della combinazione di LbLRTM e RT3.

Nei paragrafi successivi si descriverà brevemente il funzionamento dei modelli utilizzati.

2.4.1 Line by Line Radiative Transfer Model (LbLRTM)

LbLRTM è un modello diretto rapido e flessibile sviluppato e mantenuto dall'AER (Atmospheric and Environmental Research). LbLRTM ha una lunga storia, che affonda le sue radici nel progetto LOWTRAN (attivo negli anni 70) e in FASCODE (Clough et al, 1982). Si tratta di un programma scritto in fortran90, un linguaggio di alto livello il cui uso è invalso nell'ambito della fisica computazionale. LbLRTM, come suggerisce il nome, calcola gli spessori ottici *linea per linea*, con una risoluzione interna a ciascuna riga spettrale che dipende dalla forma della stessa. Questo significa che la risoluzione non è costante all'interno di uno spettro e nemmeno per le stesse righe a quote diverse, perché la FWHM di una riga dipende da numerose variabili che possono variare con la quota, come la pressione e la temperatura. LbLRTM è un modello per calcolare le radianze in condizioni di cielo sereno soltanto: non è possibile inserire nubi o aerosol. Per questo motivo è stato necessario utilizzare anche RT3 per espletare gli obiettivi del presente lavoro.

Gli input del programma sono scritti in un file chiamato *TAPE5*, un file ASCII dove sono presenti le seguenti informazioni:

- La geometria del sistema, ossia i livelli dell'atmosfera piano parallela dove si desidera calcolare gli spessori ottici dei gas;
- Il profilo di temperatura;
- Il profilo di pressione;
- I profili delle concentrazioni dei gas che desideriamo includere nella simulazione;
- I valori minimo e massimo della lunghezza d'onda dove si desidera calcolare lo spettro;
- L'angolo zenitale dove è localizzato lo strumento di misura;
- Molte altre opzioni, atte a raffinare la simulazione.

Il nome del file di input è dovuto ai retaggi di LbLRTM nel modello LOWTRAN. Negli anni 70, infatti, gli input al codice venivano dati attraverso delle schede perforate. Tuttora, per evitare ai programmatori di rivedere lo standard e agli utenti di modificare le proprie abitudini, il file *TAPE5* deve essere scritto in un formato specifico, dove ogni spazio conta. Un solo errore impedirà la lettura del file di input da

parte di LbLRTM. Probabilmente, si può ovviare a questo problema modificando leggermente il codice sorgente, eliminando laddove possibile i formati in fase di lettura. Il database da cui vengono letti i dati riguardanti le righe spettrali è HITRAN.

Il modello contiene alcune importanti funzionalità, come la possibilità di calcolare il continuo del vapore acqueo attraverso il modello MT_CKD sviluppato dagli scienziati dell'AER. Queste funzionalità sono particolarmente utili nell'ambito del presente lavoro, essendo la banda rotazionale del vapore acqueo la protagonista del trasferimento radiativo nel lontano infrarosso.

Gli output di LbLRTM possono essere due, entrambi file binari. Il primo è file TAPE12, che contiene le radianze in cielo sereno nell'intervallo spettrale specificato. Per il calcolo delle radianze, LbLRTM effettua la convoluzione con una ILS a una risoluzione spettrale specificata. È possibile decidere di calcolare gli spettri con una ILS apodizzata. Il secondo output sono i file OD_deflt. Essi contengono gli spessori ottici a tutti i livelli atmosferici dove sono stati effettuati i calcoli. Un'opzione nel file TAPE5 permette di decidere quali file di output si desiderano.

Nel nostro caso, si è deciso di calcolare entrambi gli output. I file TAPE12 non hanno subito rielaborazioni. I file OD_deflt, invece, sono stati adeguatamente rielaborati da un programma in matlab (REFIRconvLBL_downlook_RTX2.m). Dopodiché, sono stati dati come input al programma RT3 in forma di due file. Il primo, fkext.dat, è il file contenente gli spessori ottici ottenuti tramite la convoluzione delle trasmissività relative ai file OD_deflt. Nel nostro caso, la risoluzione degli spessori ottici è stata di 0.3 cm^{-1} , in un intervallo spettrale compreso tra i 100 e i 1600 cm^{-1} . Il secondo file, master.wav, contiene le frequenze relative agli spessori ottici del file fkext.dat. Entrambi i file sono binari.

Passiamo ora a una breve descrizione di RT3.

2.4.2 RT3

RT3 (Evans and Stephens, 1991) è un programma sviluppato originariamente dall'Università del Colorado per calcolare il trasferimento radiativo in presenza di aerosol orientati casualmente. Esso è stato rivisitato numerose volte fino al giorno d'oggi, ed è stato adeguato alle esigenze dei ricercatori dell'Università di Bologna. RT3, così come LbLRTM, è scritto in fortran90.

RT3 può calcolare le radianze in presenza di cieli nuvolosi, funzionalità fondamentale per portare a termine il presente lavoro. Gli input al programma sono dati attraverso dei file e una serie di codici in bash, che mi sono stati originariamente forniti dall'Università di Bologna e che ho in parte rielaborato. Tra gli input sono presenti:

- Un file di nome *profilo*, un file ASCII formato da 5 colonne contenenti la quota geometrica, la pressione, la temperatura, il file di scattering e l'ice water content (IWC) da utilizzare per ogni livello;
- Una serie di opzioni presenti nei codici screenx-scief-br-v1.sh e rt3-scief-br-v1.sh, tra cui il tipo di superficie emittente (acqua, ghiaccio, neve...), la temperatura superficiale, le lunghezze d'onda minima e massima dove calcolare le radianze, e molto altro.

I file di scattering appena citati meritano una descrizione a parte. Si tratta di file binari che contengono 1000 termini dei polinomi di Legendre di certe distribuzioni di aerosol. Essi sono fondamentali per determinare la diffusione in presenza di cieli nuvolosi. I nomi dei file di scattering sono composti da 13 caratteri e vanno letti come segue:

- I primi due caratteri sono due lettere, e indicano l'estensione dello spettro dove i polinomi di Legendre sono stati calcolati. Se le prime due lettere sono SS, il file contiene informazioni relative al vicino infrarosso. Se le prime due lettere sono SY, il file contiene informazioni relative al lontano infrarosso. Se le prime due lettere sono ST, infine, il file contiene informazioni relative a tutto l'infrarosso. Nel presente lavoro sono stati utilizzati i file ST.
- I cinque caratteri successivi (dal terzo al settimo) indicano il tipo di aerosol diffondente. Se tali caratteri sono 'solc0', ad esempio, il file contiene le proprietà diffusive di colonne esagonali solide di ghiaccio.
- I tre caratteri che seguono (dall'ottavo al decimo) indicano la metà della dimensione efficace degli aerosol. Ad esempio, i caratteri 'r20' indicano che la dimensione efficace dell'aerosol è di 40 μm .
- Gli ultimi tre caratteri (dall'undicesimo al tredicesimo) indicano il tipo di distribuzione seguita dagli aerosol. La stringa 'v01', ad esempio, indica che la distribuzione seguita è di tipo gamma con valore di picco maggiore di 0.

Legando queste stringhe, si può ottenere il nome di un file di scattering completo. Nel caso descritto sopra, si otterrebbe STsolc0r20v01.

Il principale file di output di `rt3` è `outrt`, dove sono contenute le radianze calcolate dal programma. Per scrupolo e rigore scientifico, nel corso del lavoro abbiamo comparato i file `outrt` e `TAPE12` relativi alla stessa atmosfera in cielo sereno. Questo è stato fatto per verificare che una convoluzione delle trasmissività anteriore al calcolo del trasferimento radiativo non producesse risultati diversi da quelli ottenuti tramite la procedura regolare seguita da `LbLRTM` entro l'errore di misura.

Nel prossimo paragrafo, che è pure l'ultimo di questa sezione, si descriverà il modello GBB che è stato fornito al sottoscritto dal Centro Nazionale delle Ricerche.

2.4.3 Geofit Broad Band (GBB)

Nonostante non abbia giocato un ruolo chiave nel lavoro, vale la pena descrivere a grandi linee il funzionamento di Geofit Broad Band ATSR v2.0, l'unico modello diretto di cui ho modificato il codice sorgente. Il modello è scritto in `fortran90`, come `LbLRTM` e `RT3`.

Geofit Broad Band è, in origine, un modello diretto per simulare misure al lembo. La versione che ha ricevuto il sottoscritto, Geofit Broad Band ATSR v2.0, è stata adattata a simulazioni radiometriche al nadir, ovvero quelle effettuate dai sensori ATSR. La natura del modello e dell'adattamento non si accordano perfettamente agli scopi del progetto FORUM. Anzitutto, `RFTS` è uno spettrometro con una risoluzione piuttosto alta ($\Delta\nu = 0.3 \text{ cm}^{-1}$), per cui esso percepisce la variazione dell'emissività della superficie con la lunghezza d'onda. Chiaramente, un radiometro come ATSR necessita al più di un valore medio di emissività della superficie, che è infatti l'unico input di emissività che si può dare a GBB ATSR v2.0. Inoltre, un radiometro non necessita affatto di una ILS con cui effettuare la convoluzione delle radianze, per cui anche questa caratteristica manca nel modello succitato.

Nonostante queste mancanze, Geofit Broad Band ATSR v2.0 è un modello diretto completo, che può calcolare le radianze in presenza di cielo sereno o nuvoloso, dove le nubi possono essere composte da aerosol sferiche le cui proprietà di diffusione sono date dallo scattering di Mie oppure da aerosol descritti dagli stessi file di scattering utilizzati per `RT3`. Un altro vantaggio del modello è la semplicità degli input, che sono raccolti in una serie di file ASCII senza particolari formattazioni. Tale semplicità non

è condivisa da LbLRTM. Inoltre, GBB ATSR v2.0 calcola direttamente le radianze in cielo nuvoloso, senza bisogno di effettuare le complesse operazioni di convoluzione necessarie a trasformare l'output di LbLRTM nell'input di RT3, che possono anche risultare in errori difficili da individuare.

Il motivo principale per cui il sottoscritto ha deciso di non lavorare con GBB ATSR v2.0 è il mancato aggiornamento del modello del continuo del vapore acqueo. La versione di MT_CKD presente nel modello risale al 2011, mentre l'ultimo, decisivo aggiornamento nel lontano infrarosso è avvenuto nel novembre 2016. Nonostante questo abbandono, il lavoro sul codice sorgente mi ha dato numerosi strumenti informatici che hanno fortificato notevolmente le mie capacità di programmazione in fortran.

Con questo paragrafo si chiude la descrizione dei modelli diretti che sono stati utilizzati. Nella prossima sezione sarà descritta accuratamente la procedura che è stata seguita per effettuare le simulazioni.

Sezione 3

Simulazioni

3.1 Introduzione

Come si è già detto più volte, l'obiettivo principale del presente lavoro è l'elaborazione di un modello in grado di identificare e classificare le nubi attraverso le radianze misurate da o simulate per lo strumento RFTS. È stato essenziale far sì che il dataset a disposizione fosse quanto più ampio possibile, perché sottoponendo al codice un'ampia varietà di casistiche se ne è potuta verificare la qualità. È altrettanto vero che gli spettri simulati dovevano essere in qualche modo omogenei, per evitare che il codice restituisse risultati erranei solo a causa di errori metodologici a priori. I casi studio scelti, infatti, sono sempre stati di tipo tropicale. I valori di concentrazione dei gas assorbitori scelti sono sempre stati quelli climatologici, forniti dai database IG2 e LbLRTM.

Al momento della stesura di questo manoscritto (12 agosto 2017) sono state effettuate 1024 simulazioni. Tutti gli spettri simulati che sono poi passati alla fase di rielaborazione successiva sono stati prodotti dalla combinazione dei codici LbLRTM e RT3, in presenza di una superficie oceanica, sempre con la stessa risoluzione spettrale di 0.3 cm^{-1} e nello stesso intervallo spettrale compreso tra i 100 e i 1600 cm^{-1} . I profili di temperatura e di pressione, invece, sono stati scelti da due database differenti. Il primo è il database IG2, elaborato tramite i dati di MIPAS e avente una risoluzione verticale costante di 1 km. Il secondo è il database ERA-Interim *daily* delle reanalisi di ECMWF, avente una risoluzione più elevata in troposfera. Questa scelta non del tutto ortodossa è stata fatta per diverse ragioni. Anzitutto, tutti i ricercatori che stanno lavorando per FORUM hanno utilizzato gli stessi profili standard IG2, quindi è stato necessario includerli anche nel presente lavoro. D'altra parte, il numero di profili standard IG2 è abbastanza ridotto. Infatti, sono disponibili soltanto 16 diversi profili per la fascia tropicale.

I profili IG2 sono infatti profili climatologici che vanno per fasce latitudinali. Sono presenti 8 profili per la fascia tropicale dell'emisfero nord e 8 per la fascia tropicale dell'emisfero sud. Infatti, ciascun emisfero ha 2 profili standard per stagione, uno per il giorno e uno per la notte. Si tratta di un database piuttosto limitato, che è stato necessario fortificare. Si sono scelti i profili ECMWF perché il database ERA-Interim *daily* mette a disposizione profili di temperatura e di pressione di alta qualità con elevata risoluzione temporale (6 ore). Tenendo conto che gli spettri che RFTS misurerebbe deriverebbero da profili di temperatura e di pressione istantanei e non climatologici, la scelta è sembrata ottimale al sottoscritto.

Nei prossimi paragrafi sarà descritta con maggiore dettaglio la procedura che è stata seguita per effettuare le simulazioni.

Caso studio	Origine profili di P, T e VMR H2O	Origine profili VMR gas
IG2 TRO NO WI NI	IG2	IG2
IG2 TRO NO SU DA	IG2	IG2
IG2 MI NO SU DA	IG2	IG2
IG2 TRO NO WI NI LBLGAS	IG2	LbLRTM
IG2 TRO NO WI NI wv1.1	IG2	IG2
APR 00 LA10 LO340 LBLGAS	ERA-INTERIM	LbLRTM
JAN 00 LA10 LO300	ERA-Interim	IG2
JAN 00 LA10 LO340 LBLGAS	ERA-INTERIM	LbLRTM
JAN 12 LA10 LO240	ERA-Interim	IG2
JUL 12 LA10 LO300	ERA-Interim	IG2
JUL 12 LA10 LO340	ERA-Interim	IG2
JUL 18 LA10 LO340	ERA-Interim	IG2
OCT 00 LA10 LO300	ERA-Interim	IG2
OCT 12 LA10 LO340	ERA-Interim	IG2
OCT 18 LA10 LO340	ERA-Interim	IG2

Tabella 3.1: Tabella che illustra l'origine dei dati per costruire i 15 profili utilizzati nel presente lavoro. I casi ERA-Interim provengono dal database ECMWF e sono identificati in base al mese (JAN, APR, JUL e OCT), l'orario (00, 06, 12 o 18) alla latitudine (10, ossia tropicale nell'emisfero boreale) e la longitudine (240, 300 o 340, vale a dire nell'Oceano Atlantico). I dati sono relativi all'anno 2016 e si riferiscono sempre al primo giorno del mese: i profili etichettati con JAN sono relativi al giorno 01/01/2016, quelli etichettati con APR sono relativi al giorno 01/04/2016, e così via.

3.2 Raccolta e costruzione dei profili

La prima fase è stata la raccolta dei profili di temperatura, di pressione e di concentrazione dei gas. Parte di questi profili, ossia i profili IG2, sono stati forniti al mio relatore dal Centro Nazionale delle Ricerche. Nell'ambito del progetto SCIEF, al mio relatore è stato assegnato il caso studio tropicale invernale notturno nell'emisfero boreale. La superficie doveva essere di tipo oceanico, con una temperatura di 300.93 K. Dato il forte legame di questo caso studio al progetto SCIEF, esso è stato studiato in modo molto approfondito, ed è stato il fulcro degli studi di sensibilità del presente lavoro. Abbiamo definito informalmente tale caso studio tramite la sigla *IG2 TRO NO WI NI*, vale a dire *IG2 tropical northern (emisphere) winter night*.

In totale, sono stati utilizzati 15 diversi profili in cielo sereno. Le caratteristiche dei profili sono illustrate in tabella 3.1. Esaminando tale tabella, si può notare che uno dei profili, IG2 TRO NO WI NI wv1.1, ha un nome del tutto singolare. Tale profilo, infatti, è stato ottenuto utilizzando i dati IG2 ma aumentando il VMR del vapore acqueo del 10% a tutte le quote. Tale profilo è stato creato per effettuare alcuni studi di sensibilità per il caso IG2 TRO NO WI NI.

Mentre i profili IG2 ci sono stati semplicemente inviati, costruire i profili relativi ai dati ERA-Interim è stato più complesso, tanto che per farlo è stato necessario scrivere un piccolo programma in matlab, chiamato Estrazione.m. Infatti, i dati ERA-Interim sono scaricabili dall'European Center for Medium-Range Weather Forecast (ECMWF) in formato NetCDF. Esistono diverse banche dati relative a ERA-Interim. Il sottoscritto ha scelto la banca dati definita nella griglia a 60 livelli del modello

ECMWF, perché tali livelli includono l'importante strato atmosferico a contatto con la superficie (essenziale per il corretto funzionamento dei modelli diretti) e si spingono fino a quote molto elevate (intorno ai 65 km). I livelli del modello, chiaramente, non corrispondono sempre alla stessa quota geometrica su tutta la superficie terrestre, perché in condizioni orografiche e termodinamiche diverse conviene risolvere le equazioni di Navier-Stokes a quote diverse. Le quote geometriche non sono scaricabili dal sito di ECMWF, ma sono tuttavia costruibili. La procedura seguita dal codice Estrazione.m è la seguente:

- I dati del file NetCDF (che comprende profili dell'intero pianeta) vengono estratti.
- L'unico dato di pressione disponibile, quello al suolo, viene utilizzato per costruire i valori di pressione per tutti i 60 livelli utilizzando la formula:

$$P(l) = a(l) + b(l)P_{suolo}$$

dove $a(l)$ e $b(l)$ sono delle costanti fornite dal sito ECMWF.

- Tramite l'equazione idrostatica:

$$\Delta z = \frac{\Delta P}{P} \frac{R T}{M_{mol}}$$

Il codice ricostruisce le quote geometriche.

- Il codice salva i profili di temperatura, pressione, VMR del vapore acqueo e di quota geometrica nel formato di input per LbLRTM. Si tratta di 1440 profili, tutti relativi ai 10 gradi di latitudine nord: per ciascun grado di longitudine il codice salva 4 profili, uno per le ore 00UTC, uno per le 06UTC, un altro per le 12UTC e infine uno per le 18UTC.

Sempre esaminando la tabella 3.1 si può notare come alcuni profili, come APR 00 LA10 LO340 LBLGAS, contengano i profili di VMR dei gas atmosferici estratti dal database interno di LbLRTM. Nonostante in origine questi profili fossero stati creati per una svista (si voleva in realtà utilizzare i profili IG2), si è deciso di mantenerli per dare una realistica variabilità alle simulazioni in termini di VMR dei gas assorbitori.

I gas assorbitori utilizzati per fare le simulazioni sono 37, ovvero C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CCl_4 , CH_3Cl , CH_4 , ClO , $ClONO_2$, CO_2 , $COCl_2$, CO , COF_2 , H_2O , H_2O_2 , HCN , HNO_3 , HNO_4 , N_2 , N_2O_5 , N_2O , NH_3 , NO_2 , NO , O_2 , O_3 , OCS , SF_6 , SO_2 , oltre a 8 tipi di clorofluorocarburi e al peroxiacetilnitrito.

Una volta costruiti questi 15 profili, sono stati creati tramite LbLRTM altrettanti file `fkext.dat` e `RadRefirPAD.dat`, contenenti rispettivamente gli spessori ottici in formato binario e le radianze in formato ASCII (determinate in cielo sereno). I file `fkext.dat` hanno costituito la base per le simulazioni successive effettuate tramite RT3. Per il lettore interessato, le informazioni specifiche sul lancio delle simulazioni possono essere trovate nell'appendice tecnica A.

3.3 Descrizione delle simulazioni

Le simulazioni si sono dovute prestare a due scopi: gli studi di sensibilità e l'identificazione delle nubi. Per gli studi di sensibilità, è stato necessario effettuare numerose simulazioni mirate con un profilo specifico. Per l'identificazione e la classificazione delle nubi, invece, si è ritenuto appropriato utilizzare quanti più profili possibili e con una grande varietà di nubi, in modo tale da coprire quanto più possibile la variabilità naturale. Nella tabella 3.2 si è indicato sinteticamente come sono state ripartite le simulazioni nei vari casi studio. Come si può osservare, la grande maggioranza delle simulazioni è stata

fatta in presenza di nubi. Questo non sorprende, dato che l'unico parametro che è possibile far variare tramite RT3 in uno stesso caso studio in cielo sereno è la temperatura superficiale.

In tabella è riportato anche il numero di simulazioni fatte in presenza di cirro subvisibile. Questa categoria è stata introdotta perché è molto importante verificare che il codice ICICLE per l'identificazione delle nubi da me elaborato fosse in grado di distinguere questo tipo di nubi dal resto dei casi in cielo sereno. Dato che i cirri hanno un importante effetto sul clima è fondamentale saperli identificare, anche quando il loro spessore ottico è molto piccolo.

Sono state simulate nubi con proprietà molto variabili. In tabella 3.3 si può apprezzare questo fatto. Sono state simulate nubi formate da cristalli di dimensioni efficaci molto variabili, dai rari $4 \mu\text{m}$ dei cirri più alti e sottili fino ai $50 \mu\text{m}$ tipici di nubi più basse e con elevato IWC. Gli spessori ottici coprono casi che vanno dal cirro sottile (con un minimo di $OD = 0.01$) fino a nubi di media troposfera piuttosto spesse ($OD = 10$). È importante sottolineare che gli spessori ottici di riferimento sono relativi alla lunghezza d'onda di $10 \mu\text{m}$ e sono relativi ai soli coefficienti di assorbimento. In altri termini:

$$OD_{ass}(10 \mu\text{m}) = IWC \Delta z k_{ass}(10 \mu\text{m})$$

dove IWC è l'ice water content misurato in $\frac{\text{g}}{\text{kg}}$, Δz è lo spessore della nube misurato in km, e $k_{ass}(10 \mu\text{m})$ è il coefficiente di assorbimento relativo al file di scattering alla lunghezza d'onda di 10 micron. La scelta di non utilizzare il coefficiente di estinzione è dovuta all'importanza relativamente bassa della diffusione alla lunghezza d'onda prescelta: utilizzando il coefficiente di assorbimento a 10 micron si ha una buona stima dello spessore ottico reale della nube.

Le proprietà delle nubi non sono state combinate in modo casuale. Alle quote più elevate, oltre gli 11 km, sono state poste esclusivamente nubi cirriformi, con spessori ottici bassi (inferiori a 2), mentre a quote più basse lo spessore ottico delle nubi è stato impostato su valori più elevati (fino a 10). Alla maggior parte dei cristalli di ghiaccio nei cirri subvisibile è stata assegnata una forma semplice (colonna o piatto esagonale), dato che queste forme sono prevalenti in natura quando la concentrazione di cristalli è più bassa (Gallagher et al, 2004). Al contrario, sono stati utilizzati in prevalenza aggregati di grandi dimensioni per simulare le nubi a quote più basse. Sono visibili fotografie dei cristalli di ghiaccio utilizzati per le simulazioni in figura 3.4. Si segnala inoltre che ad alcune nubi poste a bassa quota si è assegnata una composizione di aerosol sferici, ora completamente ghiacciati, ora rivestiti da uno strato di acqua (si parla di aerosol *coated*). In totale si sono dunque utilizzati 6 tipi di aerosol: colonne esagonali, piatti esagonali, bullet rosette, aggregati, sfere di ghiaccio e sfere *coated* di acqua e ghiaccio.

Con questo paragrafo si conclude la descrizione delle simulazioni. Nella prossima sezione di questo lavoro si descriverà in modo dettagliato la procedura che è stata seguita per analizzare i risultati ottenuti, sia in termini di studio di sensibilità sia in termini di identificazione e classificazione delle nubi. Alcuni degli studi di sensibilità fatti nell'ambito della tesi sono stati inclusi nella candidatura di FORUM al bando Earth Explorer 9 dell'Agenzia Spaziale Europea.

Caso studio	Totale	Nube spessa	Cirro sub.	Sereno
IG2 TRO NO WI NI	203	156	40	7
IG2 TRO NO SU DA	33	20	6	7
IG2 MID NO SU DA	27	18	4	5
IG2 TRO NO WI NI LBLGAS	163	128	25	10
IG2 TRO NO WI NI wv1.1	147	109	32	6
APR 00 LA10 LO340 LBLGAS	155	124	23	8
JAN 00 LA10 LO300	24	17	5	2
JAN 00 LA10 LO340 LBLGAS	116	90	19	7
JAN 12 LA10 LO240	23	16	5	2
JUL 12 LA10 LO300	30	17	7	6
JUL 12 LA10 LO340	30	18	7	5
JUL 18 LA10 LO340	28	17	6	5
OCT 00 LA10 LO300	22	16	4	2
OCT 12 LA10 LO340	29	17	7	5
OCT 18 LA10 LO340	28	17	6	5
Tutti	1058	782	189	89

Tabella 3.2: Tabella che illustra la suddivisione delle simulazioni per tipologia tra i vari casi studio. Con la dicitura *nube spessa* si indicano tutte le simulazioni fatte in presenza di copertura nuvolosa diversa dal cirro subvisibile (vale a dire, lo spessore ottico a $10\mu\text{m}$ è superiore a 0.03). Con la dicitura *cirro sub.*, si identificano le simulazioni fatte in presenza di cirro subvisibile ($OD \leq 0.03$). Con la dicitura *sereno*, si indicano le simulazioni fatte in assenza di nubi. Dallo stesso caso studio si può ottenere più di un caso in cielo sereno perché si può far variare la temperatura superficiale.

Proprietà	Numero simulazioni	Proprietà	Numero simulazioni
ΔT_{surf}	$285 \leq T_{surf} \leq 305$	$OD = 1.00$	92
$r_{eff} = 2\mu\text{m}$	15	$OD = 1.30$	12
$r_{eff} = 4\mu\text{m}$	38	$OD = 2.00$	12
$r_{eff} = 5\mu\text{m}$	49	$OD = 3.00$	25
$r_{eff} = 6\mu\text{m}$	43	$OD = 3.50$	15
$r_{eff} = 9\mu\text{m}$	16	$OD = 5.00$	68
$r_{eff} = 10\mu\text{m}$	119	$OD = 7.00$	15
$r_{eff} = 14\mu\text{m}$	1	$OD = 8.00$	15
$r_{eff} = 15\mu\text{m}$	8	$OD = 10.00$	14
$r_{eff} = 16\mu\text{m}$	15	$H_{base} = 4\text{ km}$	14
$r_{eff} = 20\mu\text{m}$	98	$H_{base} = 6\text{ km}$	39
$r_{eff} = 30\mu\text{m}$	264	$H_{base} = 7\text{ km}$	44
$r_{eff} = 40\mu\text{m}$	93	$H_{base} = 8\text{ km}$	105
$r_{eff} = 50\mu\text{m}$	195	$H_{base} = 9\text{ km}$	14
$OD = 0.01$	29	$H_{base} = 11\text{ km}$	31
$OD = 0.02$	28	$H_{base} = 12\text{ km}$	64
$OD = 0.03$	132	$H_{base} = 13\text{ km}$	572
$OD = 0.10$	25	$H_{base} = 14\text{ km}$	35
$OD = 0.20$	140	$H_{base} = 15\text{ km}$	51
$OD = 0.30$	25	Spessore=1 km	973
$OD = 0.50$	282	Spessore=2 km	64
$OD = 0.70$	40	Spessore=3 km	23

Tabella 3.3: Tabella che illustra la suddivisione delle simulazioni per proprietà delle nubi e della superficie oceanica.

Habit	Numero simulazioni	Habit	Numero simulazioni
sbur	167	solc	208
plat	231	cl8e	290
spIce	15	ctd01	5
ctd01	38	spWat	15

Tabella 3.4: Tabella che illustra la suddivisione delle simulazioni secondo la forma e la fase degli aerosol che compongono le nubi. Per quanto riguarda i cristalli, con *plat* si indicano i piatti esagonali, con *solc* si indicano le colonne esagonali, con *sbur* si indicano le bullet rosette e con *cl8e* si indicano aggregati composti da 8 colonne esagonali. Per quanto riguarda le sfere, con *spIce* si indicano sfere di ghiaccio puro, con *coat01* e *coat02* si indicano sfere di ghiaccio ricoperte da acqua (in diverse proporzioni), con *spWat* si indicano sfere di acqua liquida pura.

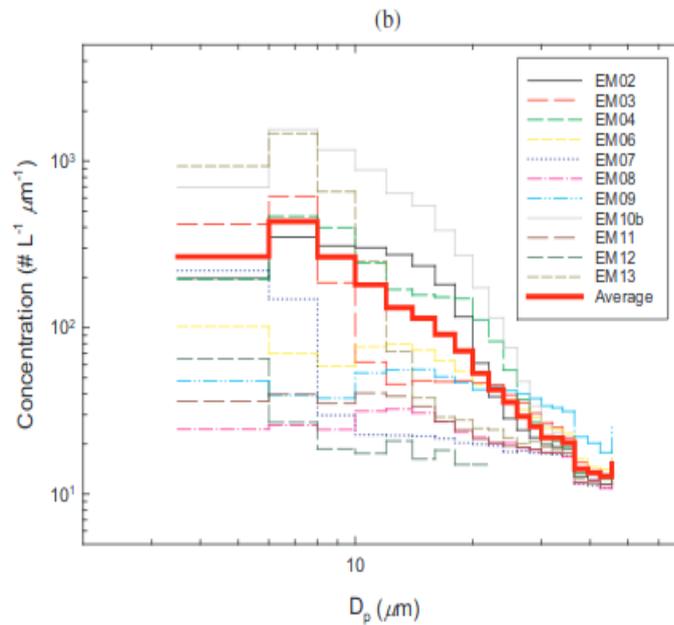


Figura 3.1: Distribuzione dimensionale dei cristalli di ghiaccio nei cirri (Gallagher et al, 2004). Nelle simulazioni effettuate nel presente lavoro è stata coperta l'intera variabilità rappresentata in figura.

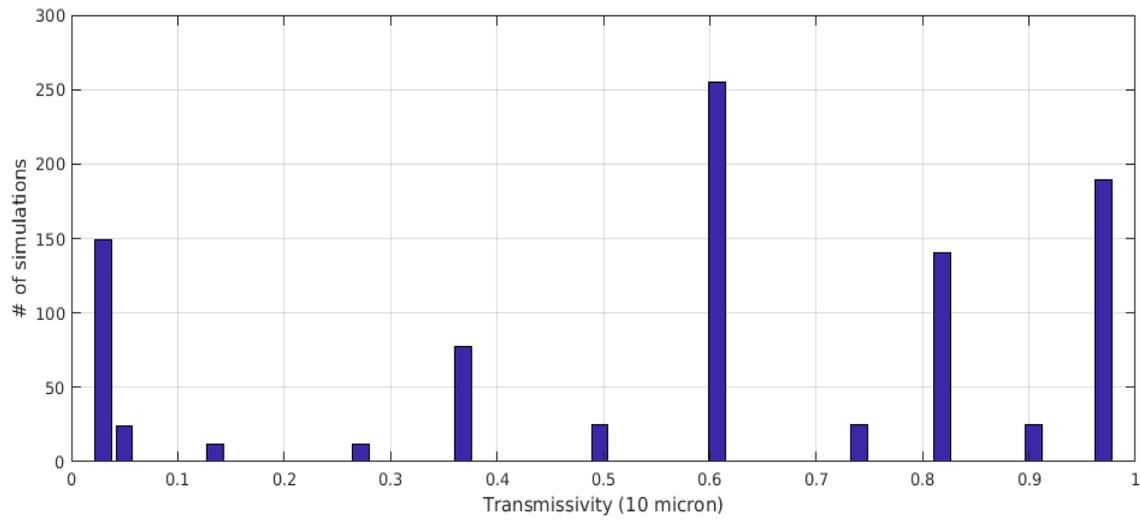


Figura 3.2: Istogramma delle simulazioni effettuate secondo la trasmissività t a 10 micron ($t(10\ \mu\text{m}) = \exp(-\text{OD}(10\ \mu\text{m}))$).

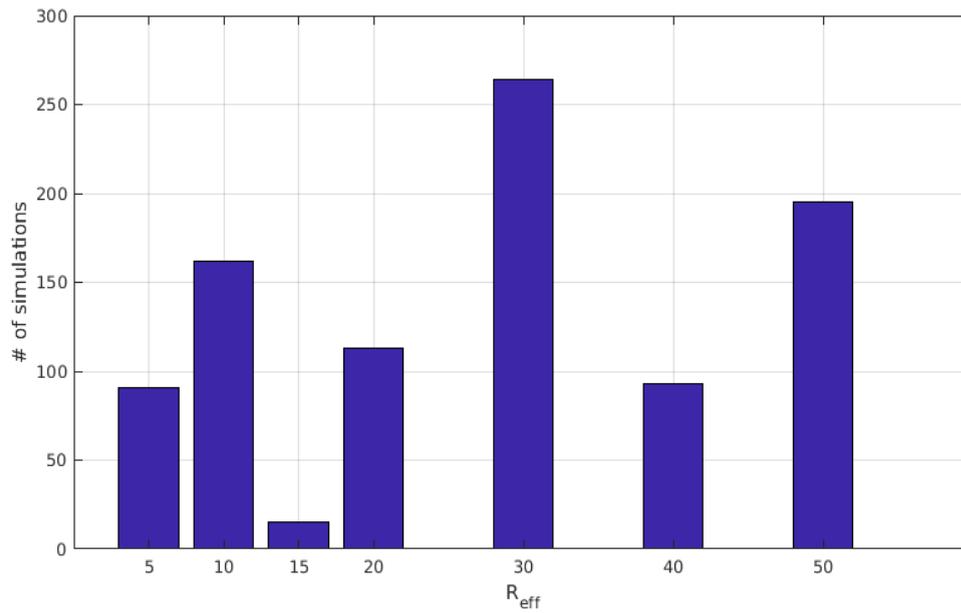


Figura 3.3: Istogramma delle simulazioni effettuate secondo il raggio efficace delle particelle contenute nelle nubi.

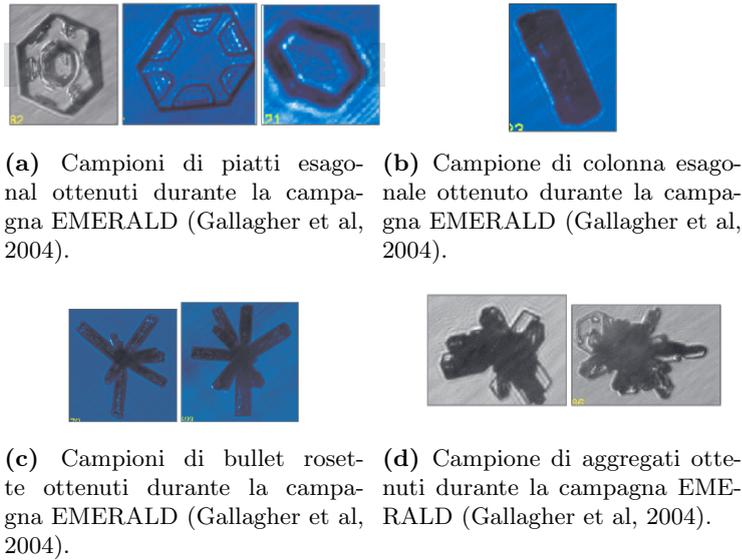


Figura 3.4: Immagini che rappresentano le quattro forme dei cristalli di ghiaccio (in inglese *habit*) utilizzate nelle simulazioni del presente lavoro, oltre alla forma sferica.

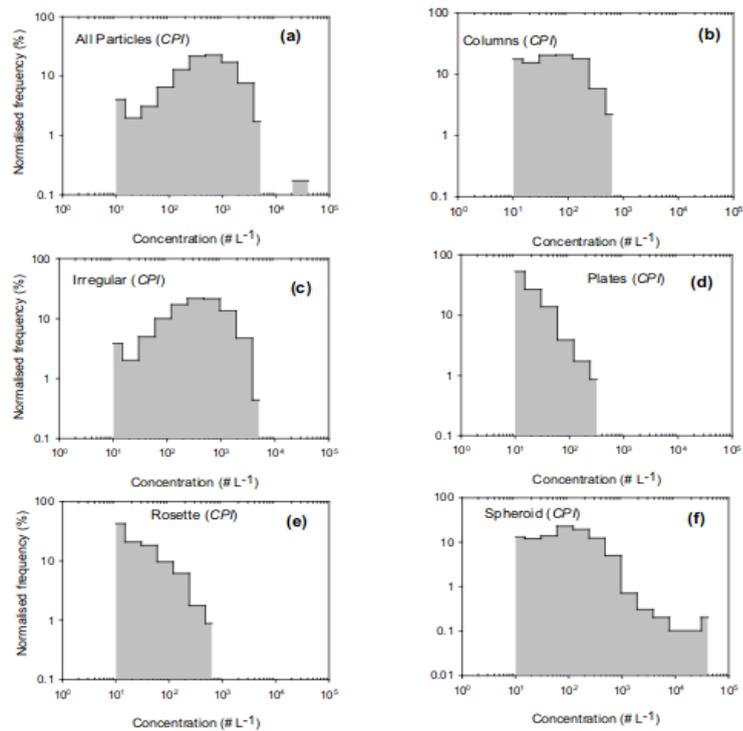


Figura 3.5: Frequenza della presenza dei vari *habit* dei cristalli di ghiaccio nei cirri a seconda della concentrazione di aerosol (Gallagher et al., 2004). Si nota come le forme regolari (piatti esagonali, bullet rosette) siano dominanti per basse concentrazioni di aerosol, mentre le forme irregolari siano dominanti per alte concentrazioni di aerosol.

Sezione 4

Analisi dei dati

4.1 Introduzione

Dopo aver eseguito le simulazioni descritte nella sezione precedente, è iniziata la fase di analisi dei dati. Tale analisi è stata suddivisa in due tronconi. Nel primo sono stati raccolti i cosiddetti *studi di sensibilità*. Si tratta di comparazioni mirate tra alcune simulazioni volte a mostrare gli effetti sullo spettro della variazione di un singolo parametro nelle simulazioni. Il secondo troncone, invece, è consistito nella scrittura di un algoritmo ad apprendimento automatico per l'identificazione e la classificazione delle nubi, chiamato ICICLE (Ice Cloud Identification and Classification through Longwave Emission). In questa sezione saranno descritti gli studi di sensibilità e il funzionamento di ICICLE.

Dato che la principale caratteristica distintiva di RFTS è la sua capacità di misurare radianze nel lontano infrarosso ($100\text{-}660\text{ cm}^{-1}$), gli studi di sensibilità sono stati volti alla dimostrazione che la variazione dei parametri nelle simulazioni porta un segnale ben riconoscibile in tale porzione dello spettro. Tali studi non permettono di effettuare un *retrieval* delle proprietà delle nubi e dell'atmosfera in cui esse si trovano, perché in essi si fa variare esclusivamente un parametro scelto *ad hoc*. Tuttavia, essi sono utili per individuare le regioni spettrali dove far concentrare gli sforzi dei modelli inversi. Tramite gli studi effettuati nel presente lavoro, ad esempio, si sono osservate sensibilità relativamente forti all'*habit* dei cristalli di ghiaccio nelle microfinestre della banda rotazionale del vapore acqueo. La consapevolezza di questo fatto può essere sfruttata nei modelli inversi, che tramite tale sensibilità potranno tentare di dedurre l'*habit* dei cristalli di ghiaccio in una nube osservata da RFTS. Tutti gli studi di sensibilità sono stati effettuati utilizzando il caso studio IG2 TRO NO WI NI, essendo in comune a tutti i ricercatori del progetto SCIEF.

Nel presente lavoro non si è fatto uso di un modello inverso perché lo scopo precipuo, ovvero l'identificazione e la classificazione delle nubi, non ha richiesto l'ottenimento di un profilo verticale delle proprietà microfisiche delle nubi. È stato invece elaborato un algoritmo ad apprendimento automatico in MATLAB. Tale algoritmo, flessibile e ricco di opzioni, classifica gli spettri in due classi secondo un criterio voluto dall'utente. La classificazione si basa su un modello creato tramite un piccolo insieme di partenza, detto *training set*, dei cui elementi è nota l'appartenenza a l'una o all'altra classe.

In questa sezione saranno descritti gli studi di sensibilità e il funzionamento del codice ICICLE. I risultati prodotti da ICICLE, invece, saranno esposti dettagliatamente nella prossima sezione.

4.2 Studi di sensibilità

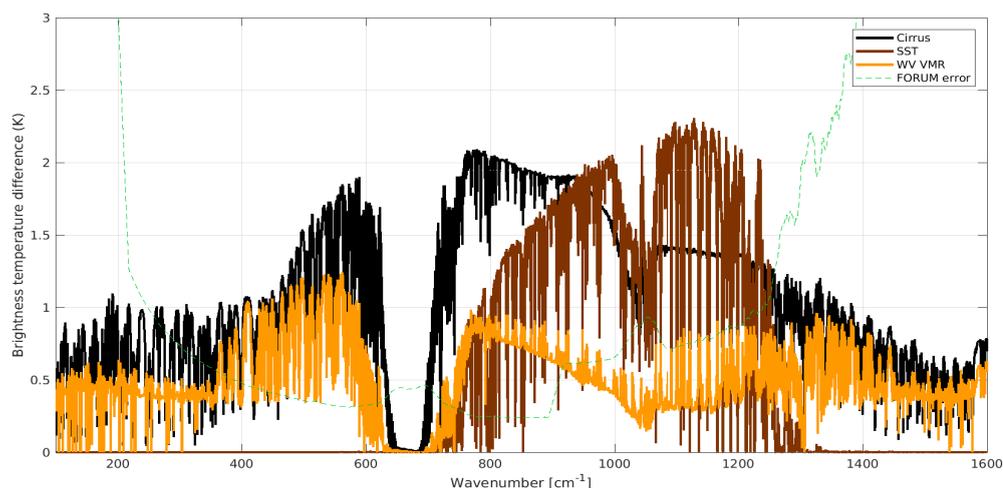


Figura 4.1: Rappresentazione grafica del primo studio di sensibilità. Le curve disegnate rappresentano le differenze di temperatura di brillantezza tra un caso di riferimento e tre casi specifici. In ordinata sono rappresentate le differenze di temperatura di brillantezza tra un caso di riferimento e cinque casi specifici e in ordinata i numeri d'onda in cm^{-1} . Il caso di riferimento è un cielo sereno della classe IG2 TRO NO WI NI, con una temperatura superficiale di 300.93 K. I casi specifici sono un altro cielo sereno della classe IG2 TRO NO WI NI con una temperatura superficiale di 297.93 K (curva arancione), un'atmosfera della classe IG2 TRO NO WI NI con cielo coperto da un cirro sottile e temperatura superficiale di 300.93 K (curva nera), e un ultimo cielo sereno della classe IG2 TRO NO WI NI wv1.1 con temperatura superficiale di 300.93 K (curva marrone). La linea tratteggiata verde rappresenta una stima dell'errore di RFTS.

Come abbiamo già visto nella sezione 3.3, il numero di parametri indipendenti che si sono fatti variare nel corso delle simulazioni sono 6, vale a dire:

1. Quota della base della nube, H_{base} .
2. Spessore geometrico della nube, Δz
3. Spessore ottico della nube alla lunghezza d'onda di $10 \mu\text{m}$, OD .
4. Dimensione efficace dei cristalli, D_{eff} .
5. L'habit dei cristalli, h_{part} .
6. Temperatura superficiale, T_{surf} .

È stato fatto variare anche il contenuto di vapore acqueo nella colonna, ma con modalità differenti (si faccia sempre riferimento alla sezione 3.3). Gli studi di sensibilità hanno evidenziato alcune potenzialità di RFTS, e per questo sono stati inclusi nella proposta FORUM per la missione Earth Explorer 9 *Fast Track*, sottomessa all'Agenzia Spaziale Europea nel giugno 2017. Sono stati effettuati quattro studi di sensibilità, uno riguardante le proprietà ottiche delle nubi e tre riguardanti le loro proprietà microfisiche.

4.2.1 Primo studio: cirri *subvisible*

Il primo studio di sensibilità è stato dedicato all'identificazione del segnale dato da un cirro molto sottile. Esso è rappresentato in figura 4.1. Un cirro con spessore ottico inferiore a 0.03 è detto *subvisible* (Sassen e Dodd, 1989). L'identificazione di un cirro *subvisible* con gli strumenti attualmente a disposizione risulta difficoltosa. Essa è tuttavia importante, perché essi contribuiscono positivamente all'effetto serra, dato che il loro albedo è quasi trascurabile (Spreitzer et al, 2016). I cirri *subvisible* hanno una frequenza intorno al 50% nelle regioni tropicali (Wang et al, 1996) e questo giustifica l'importanza di uno studio approfondito sul tema.

In questo studio, si sono comparati i segnali dati dalle differenze in temperatura di brillantezza (ΔBT) tra un caso di riferimento e tre casi specifici. Come descritto in figura, il segnale di riferimento è uno spettro in temperatura di brillantezza simulato in condizioni di cielo sereno e una temperatura superficiale $T_{surf} = 300.93$ K. Nei tre casi specifici sono state introdotte delle modifiche al caso di riferimento:

- Nel primo caso, la temperatura superficiale è stata posta a 297.93 K, rispetto ai 300.93 K del caso di riferimento.
- Nel secondo caso è stato introdotto un cirro sottile tra i 13000 e i 14000 m di quota, composto da piatti esagonali di dimensione efficace $D_{eff} = 60 \mu\text{m}$ e di spessore ottico $OD(10 \mu\text{m}) = 0.03$.
- Nel terzo caso è stato fatto aumentare il VMR di vapore acqueo a tutte le quote del 10%.

Sono stati selezionate queste casistiche perché i segnali che producono possono essere facilmente confusi. Ad esempio, se ci limitassimo allo studio del medio infrarosso, ipotizzare che nel campo di vista sia presente un cirro sottile con $T_{surf} = 300.93$ K o che il cirro sia assente ma la temperatura superficiale sia di 297.93 K può risultare quantitativamente simili, sebbene con un andamento spettrale non sovrapponibile. Il primo studio di sensibilità evidenzia che ciò non è vero nel lontano infrarosso, dove la presenza del cirro sottile introduce una variazione della temperatura di brillantezza rilevabile da RFTS tra i 300 cm^{-1} e i 650 cm^{-1} , mentre nella stessa porzione dello spettro la modifica della temperatura superficiale non ha alcun effetto sul segnale, a causa del forte assorbimento ivi presente.

Facendo riferimento alla figura 4.1, si può notare come un aumento del 10% del VMR di vapore acqueo nella colonna d'aria produca un segnale anche nel lontano infrarosso. Nonostante ciò, la componente relativa al cirro si distingue per il diverso andamento nella finestra atmosferica principale ($750\text{-}1000 \text{ cm}^{-1}$) e nella banda della CO_2 ($600\text{-}700 \text{ cm}^{-1}$). In particolare, la presenza del cirro sottile produce consistenti differenze in temperatura di brillantezza rispetto al caso di riferimento in prossimità del centro della banda, maggiori di quelle prodotte da un aumento di vapore acqueo a tutte le quote. Ciò è dovuto all'elevata quota del cirro, che supera il massimo della funzione peso anche in regioni dello spettro non lontane dal centro della banda della CO_2 (668 cm^{-1}). Infine, l'effetto del cirro e dell'aumento di vapore acqueo risultano quantitativamente simili nel lontano infrarosso e molto diversi nella finestra atmosferica principale, un fatto che permette di discriminare i due segnali.

In conclusione, il primo studio di sensibilità mostra che RFTS può permettere ai modelli inversi di riconoscere dei cirri molto sottili. È importante sottolineare che, trovandoci in atmosfera tropicale, la differenza tra la temperatura dei cirri ($T_{cirro} \approx 195$ K) e la temperatura della superficie ($T_{surf} \approx 300$ K) è particolarmente alta. È per questo motivo che il segnale introdotto dalla nube appare consistente, nonostante lo spessore ottico modesto. Una tale differenza tra la temperatura della superficie e la temperatura della tropopausa può essere riscontrata nella fascia tropicale, ma quanto più la latitudine aumenta, tanto più la differenza si riduce e diventa dipendente dalla stagione. Per questo motivo è va

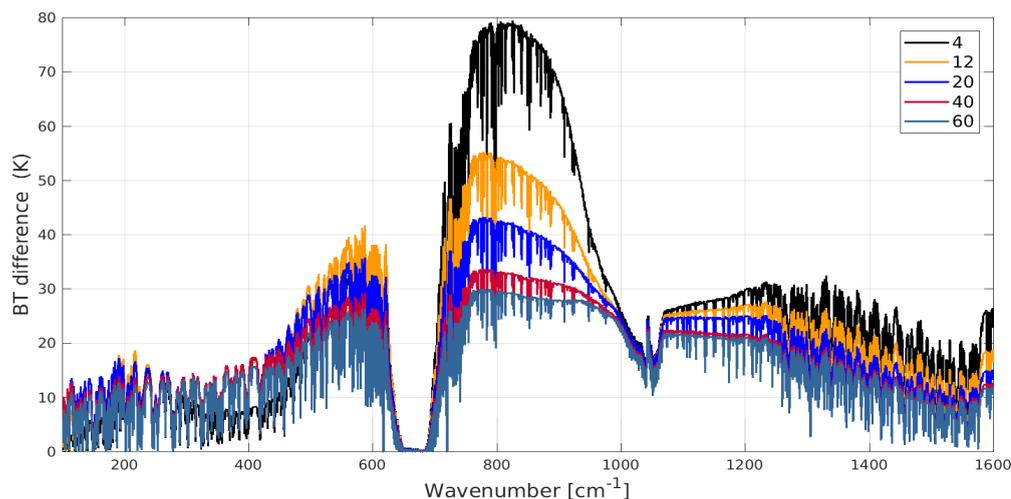


Figura 4.2: Rappresentazione grafica del secondo studio di sensibilità. In ordinata sono rappresentate le differenze di temperatura di brillanza tra un caso di riferimento e cinque casi specifici e in ascissa i numeri d'onda in cm^{-1} . Il caso di riferimento è un cielo sereno della classe IG2 TRO NO WI NI con temperatura superficiale di 300.93 K. I casi specifici consistono in cinque atmosfere della classe IG2 TRO NO WI NI in cui è stato posto un cirro. In tutti e cinque i casi il cirro è composto da piatti esagonali, la cui dimensione efficace è stata fatta variare tra i $4 \mu\text{m}$ (linea nera) e i $60 \mu\text{m}$ (linea bluastrea).

sottolineato che questo studio di sensibilità può essere ritenuto valido soltanto nella fascia tropicale.

4.2.2 Secondo studio: dimensioni dei cristalli

Il secondo studio di sensibilità è stato dedicato alle proprietà microfisiche delle nubi, e in particolare le dimensioni efficaci dei cristalli di ghiaccio.

Come nello studio precedente, sono stati comparate le differenze tra gli spettri in temperatura di brillanza tra un caso di riferimento e alcuni casi specifici. Il caso di riferimento è identico a quello del precedente studio. I cinque casi specifici sono tutti quanti relativi a un cirro di spessore 1 km, posto tra i 13 000 m e i 14 000 m di quota, di spessore ottico a $10 \mu\text{m}$ pari a 0.5 e composto da piatti esagonali. Le dimensioni efficaci dei piatti esagonali sono state fatte variare tra un minimo di $6 \mu\text{m}$ e un massimo di $60 \mu\text{m}$.

Come si può desumere agevolmente osservando la figura 4.2, l'effetto quantitativamente più marcato è localizzato nella finestra principale dell'infrarosso, dove le differenze in temperature di brillanza rispetto al caso di riferimento sfiorano gli 80 K. Nella stessa regione spettrale si osserva anche la sensibilità più forte alla variazione della dimensione dei cristalli di ghiaccio, che appare tanto più marcata quanto sono più piccoli i cristalli di ghiaccio che compongono la nube. I cristalli di ghiaccio più piccoli producono la diminuzione più marcata del segnale.

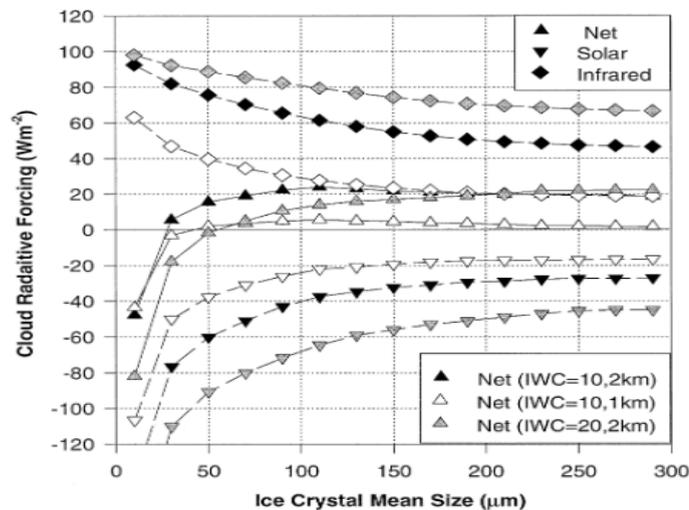


Figura 4.3: Forcing radiativo dei cirri a seconda del raggio efficace dei cristalli che li compongono. L'immagine è tratta da uno studio di Zhang et al (1999).

La diminuzione del segnale prodotta dai cristalli più piccoli è in accordo con alcuni studi, in cui si evidenzia che una minore dimensione dei cristalli di ghiaccio produce un forcing radiativo più forte nell'infrarosso (Zhang et al, 1999). Infatti, il forcing radiativo planetario può essere calcolato tramite la seguente formula:

$$Forcing = R_{ass} - R_{em}$$

Dove R_{ass} è la potenza assorbita dal sistema Terra-atmosfera, e R_{em} è la potenza emessa dal sistema Terra-atmosfera verso lo spazio. Se a parità di R_{ass} la potenza emessa verso lo spazio è minore, allora il forcing radiativo sarà maggiore in modulo. Nell'infrarosso, il termine R_{ass} è di alcuni ordini di grandezza inferiore rispetto al termine R_{em} , perché la radiazione solare ricade principalmente a frequenze più elevate. Per questa ragione, a un segnale significativamente più basso nell'infrarosso corrisponde un forcing radiativo maggiore.

Una caratteristica rilevante che emerge dalla figura 4.2 è la peculiarità del segnale dato dalla distribuzione di cristalli di dimensione efficace $4 \mu\text{m}$. Esso è infatti il più intenso nella finestra principale dell'infrarosso e il meno intenso nella banda rotazionale del vapore acqueo. Ciò rende questa distribuzione di particelle ben riconoscibile, specialmente se si utilizza il lontano infrarosso.

Per delineare una giustificazione teorica di quanto osservato, è possibile ricorrere alla teoria di Mie. Tale teoria, pur non essendo valida per cristalli di forma non sferica, è comunque applicabile in prima approssimazione: nel terzo studio di sensibilità, infatti, si può osservare come grandi variazioni della forma del cristallo di ghiaccio producano delle differenze in BT di appena 1 o 2 K nella finestra principale dell'infrarosso, mentre la variazione della dimensione efficace del cristallo produce differenze in BT di decine di K.

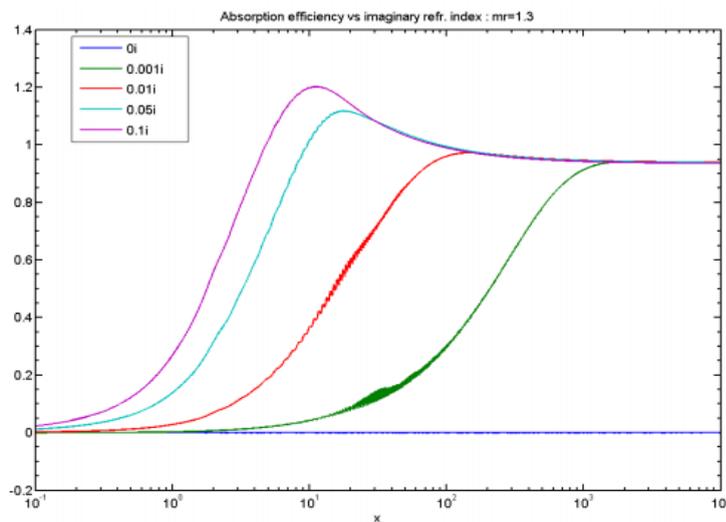


Figura 4.4: Efficienza di assorbimento calcolata tramite la teoria di Mie, con diverse parti immaginarie dell'indice di rifrazione.

Prima di tutto, si faccia un ragionamento molto semplice. Se le nubi sono composte in prevalenza da cristalli molto grandi, il loro comportamento nei confronti della radiazione sarà descritto abbastanza bene dall'ottica geometrica in tutto l'infrarosso. In tale approssimazione, la sezione d'urto di assorbimento è uguale alla sezione d'urto fisica del cristallo, e non dipende dalla lunghezza d'onda. Il segnale risulterà quindi relativamente piatto.

Se invece i cristalli sono molto piccoli, e la loro dimensione efficace è comparabile con quella della lunghezza d'onda incidente, la sezione d'urto di assorbimento non coinciderà sempre con la sezione d'urto fisica e subirà maggiori variazioni spettrali, specialmente in coincidenza di grandi variazioni della parte immaginaria dell'indice di rifrazione del ghiaccio. Tali variazioni possono essere studiate, in prima approssimazione, tramite la teoria di Mie.

In figura 4.5 si può osservare che la parte immaginaria dell'indice di rifrazione del ghiaccio passa da m_i per $\lambda = 10 \mu\text{m}$ a $m_i = 0.4$ per $\lambda = 8 \mu\text{m}$. In prima approssimazione, è proprio a causa di questa variazione che si osserva il particolare comportamento dei cristalli con dimensione efficace più piccola nella finestra principale dell'infrarosso.

Chiaramente, non è sufficiente utilizzare la teoria di Mie per spiegare le discrepanze osservate. I coefficienti di assorbimento **devono essere calcolati per la specifica distribuzione di cristalli**, che contiene elementi sia di dimensioni molto piccole che di dimensioni molto grandi. Inoltre, **la forma del cristallo ha un effetto**, sebbene sia un effetto del secondo ordine. A titolo di confronto, si sono riportati i coefficienti di assorbimento relativi a due distribuzioni utilizzate nelle simulazioni in figura 4.6.

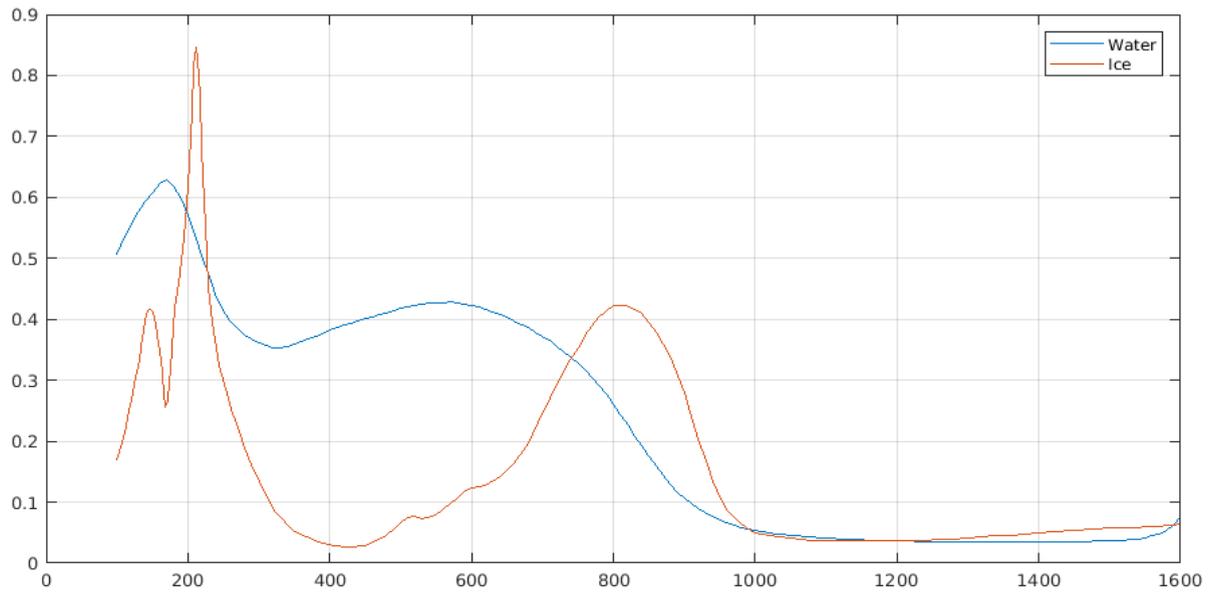


Figura 4.5: Parte immaginaria dell'indice di rifrazione dell'acqua in fase liquida (in rosso) e solida (in blu). Gli indici di rifrazione del ghiaccio sono stati presi dal database Warren, S. G., and R. E. Brandt (2008), mentre gli indici di rifrazione dell'acqua sono stati presi dal database Downing (1975).

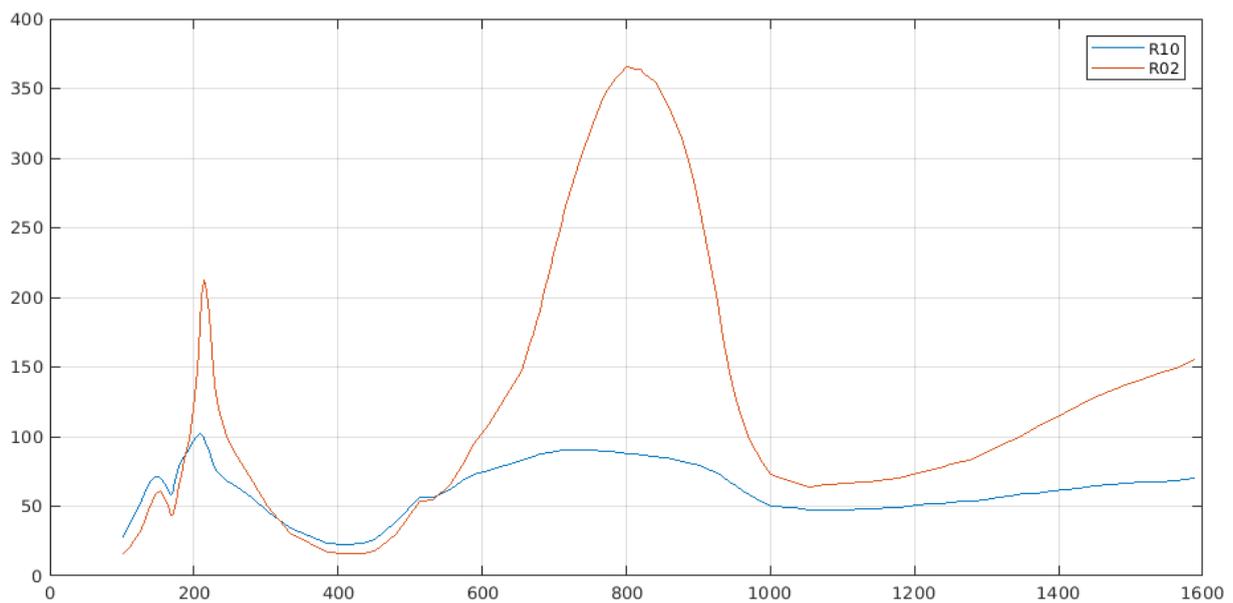


Figura 4.6: Coefficienti di assorbimento calcolati per le distribuzioni STplat0r02v01 (cristalli di raggio efficace 2 micron) e STplat0r10v01 (cristallo di raggio efficace 10 micron). Si noti come i coefficienti di assorbimento per i cristalli più piccoli siano molto più variabili e dipendenti dalla parte immaginaria dell'indice di rifrazione dell'acqua in fase solida.

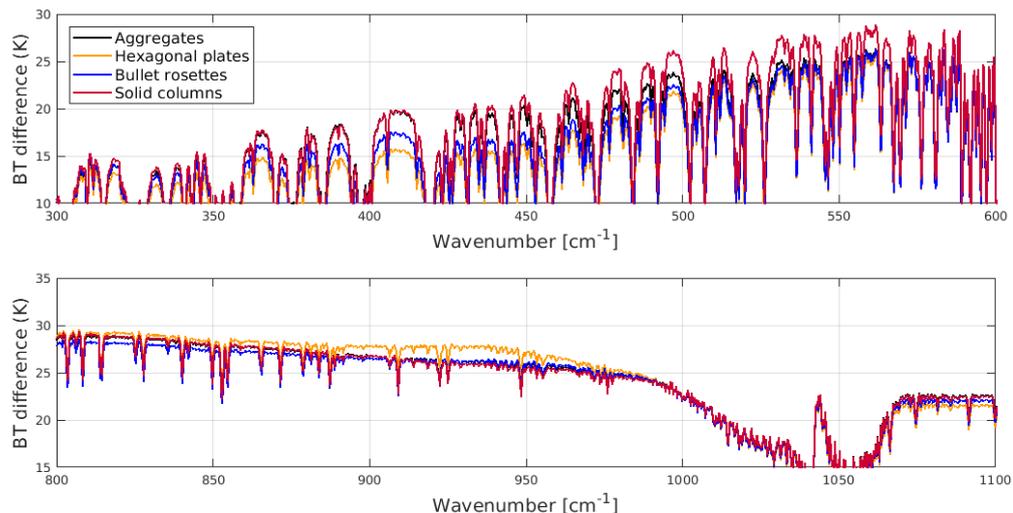


Figura 4.7: Prima rappresentazione grafica del terzo studio di sensibilità. In ordinata sono rappresentate le differenze di temperatura di brillantezza tra un caso di riferimento e quattro casi specifici e in ascissa i numeri d'onda in cm^{-1} . Il caso di riferimento è un cielo sereno della classe IG2 TRO NO WI NI con temperatura superficiale di 300.93 K. I casi specifici consistono in quattro atmosfere della classe IG2 TRO NO WI NI in cui è stato posto un cirro. In tutti e quattro i casi il cirro è composto da cristalli di dimensione efficace pari a $60 \mu\text{m}$, il cui *habit* è stato fatto variare tra aggregati (linea nera), piatti esagonali (linea blu), bullet rosette (linea rossa) e colonne solide (linea dorata). Nel pannello superiore sono rappresentati i numeri d'onda del lontano infrarosso, mentre nel pannello inferiore sono rappresentati i numeri d'onda del medio infrarosso.

4.2.3 Terzo studio: *habit* dei cristalli

Il terzo studio di sensibilità è incentrato sulle proprietà microfisiche delle nubi, e in particolare sull'*habit* dei cristalli di ghiaccio. Come negli altri casi, sono stati comparate le differenze tra gli spettri in temperatura di brillantezza tra un caso di riferimento e alcuni casi specifici. Il caso di riferimento è identico a quello degli studi precedenti. I quattro casi specifici sono tutti quanti relativi a un cirro di spessore 1 km, posto tra i 13 000 m e i 14 000 m di quota, di spessore ottico $OD(10 \mu\text{m}) = 0.5$ e composto da cristalli di ghiaccio di dimensione efficace $60 \mu\text{m}$. L'*habit* dei cristalli di ghiaccio è stato fatto variare. Sono state simulate nubi composte da aggregati, piatti esagonali, bullet rosette e colonne esagonali.

Come si può desumere dalla figura 4.7, il segnale dovuto all'*habit* dei cristalli di ghiaccio è di un ordine di grandezza inferiore rispetto al segnale dovuto alla dimensione dei cristalli di ghiaccio. Infatti, a parità di spessore ottico, la differenza di temperatura di brillantezza massima tra i segnali dati da due *habit* differenti tocca i 5 K, mentre nel caso precedente si toccavano i 50 K. Per questa ragione, è ben più difficile effettuare il *retrieval* dell'*habit* dei cristalli di ghiaccio che compongono una nube.

È importante sottolineare che l'effetto sul segnale dovuto all'*habit* dei cristalli è dovuto principalmente alle loro proprietà di diffusione. Infatti, per cristalli di forma non sferica la soluzione di Mie non è più valida, e la loro funzione di fase è diversa rispetto a quella di una *sfera equivalente*. Una sfera equivalente è una sfera suddivisa in gusci, la cui densità è variabile ed è uguale a quella della frazione di cristallo che ricade in tale guscio.

Dato che l'effetto è prevalentemente dovuto alla diffusione, esso è meno evidente nella finestra principale dell'infrarosso, dove la parte immaginaria dell'indice di rifrazione del ghiaccio raggiunge un massimo e gli effetti dovuti all'assorbimento sono prevalenti. In questo contesto risulta di particolare utilità l'en-

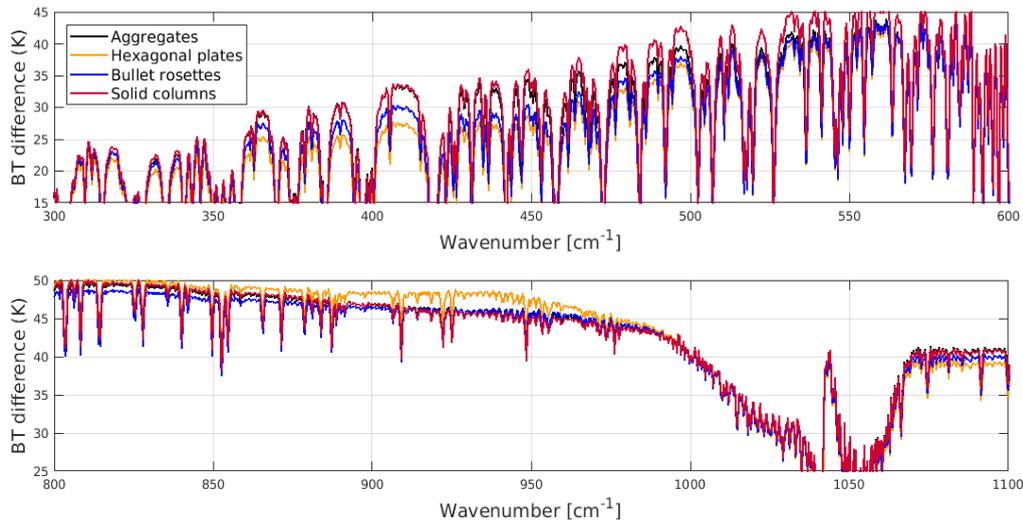


Figura 4.8: Seconda rappresentazione grafica del terzo studio di sensibilità. In questo caso, lo spessore ottico dei cirri dei casi specifici è stato posto uguale a 1. Il segnale dato dai diversi *habit* risulta leggermente amplificato.

tensione nel lontano infrarosso provvisto da RFTS. Infatti, attorno ai 400 cm^{-1} l'indice di rifrazione del ghiaccio raggiunge un minimo, e le differenti proprietà di diffusione dei diversi *habit* dei cristalli di ghiaccio risultano più evidenti. Come si può notare osservando la figura 4.7, nelle microfinestre della banda rotazionale del vapore acqueo le differenze in segnale tra i piatti esagonali e le colonne esagonali raggiunge i 5 K, contro i 2 K che si toccano nella finestra principale dell'infrarosso. È importante notare che il segnale nella finestra principale dell'infrarosso si identifica con più difficoltà perché tale porzione dello spettro è particolarmente sensibile alla dimensione efficace dei cristalli di ghiaccio, alla temperatura della superficie e allo spessore ottico delle nubi, mentre il segnale nel lontano infrarosso è meno sensibile se non del tutto insensibile a questi fattori (come nel caso della temperatura superficiale). Bisogna inoltre tenere conto che le misure di RFTS sono affette da un errore in temperatura di brillantezza che può arrivare a 1 K.

Si nota anche come i segnali più estremi sono dovuti agli *habit* che si discostano maggiormente da quella sferica, vale a dire i piatti esagonali e le colonne esagonali. Gli aggregati e le bullet rosette risultano di più difficile identificazione.

Si osservino infine le figure 4.9 e 4.10. Si può facilmente evincere da esse che il segnale dovuto agli *habit* è tanto maggiore quanto maggiore è la dimensione dei cristalli di ghiaccio. Questo è dovuto al fatto che i coefficienti di diffusione dei cristalli di piccole dimensioni sono simili tra loro, mentre i coefficienti di diffusione dei cristalli più grandi mutano in modo considerevole a seconda dell'*habit*. Infatti, all'approssimarsi a 0 del *size parameter*, l'approssimazione data dallo *scattering di Rayleigh* inizia ad essere valida, e in tale approssimazione la forma dei centri di diffusione non ha rilevanza. Il terzo studio di sensibilità spinge dunque a pensare che l'identificazione dell'*habit* dei cristalli di ghiaccio sia ben più agevole se tali cristalli sono di dimensioni relativamente grandi.

In sintesi, il lontano infrarosso fornisce informazioni per l'identificazione dell'*habit* dei cristalli di ghiaccio. Si parla comunque di un esercizio virtuoso: il segnale è solo appena rilevabile.

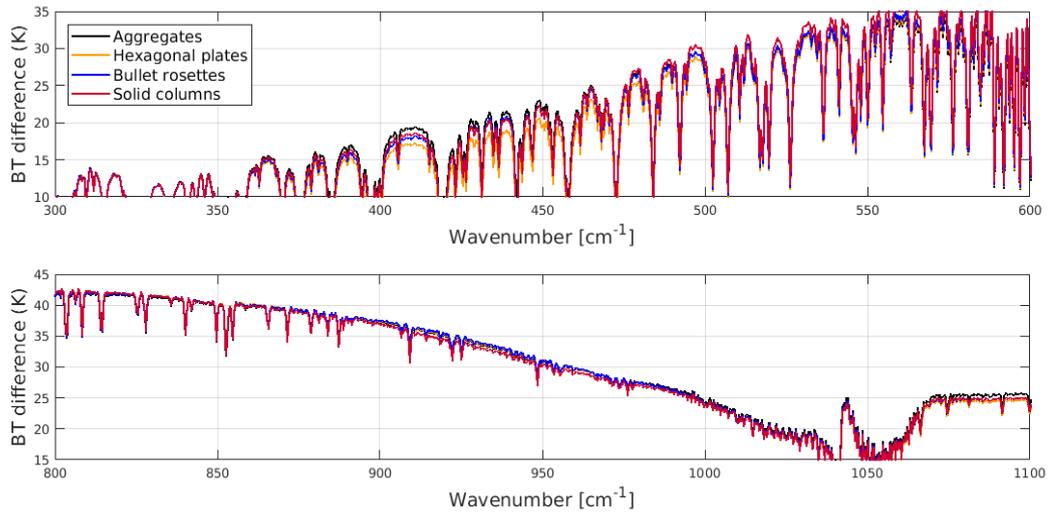


Figura 4.9: Terza rappresentazione grafica del terzo studio di sensibilità. In questo caso, la dimensione efficace delle particelle è stata posta uguale a $20 \mu\text{m}$.

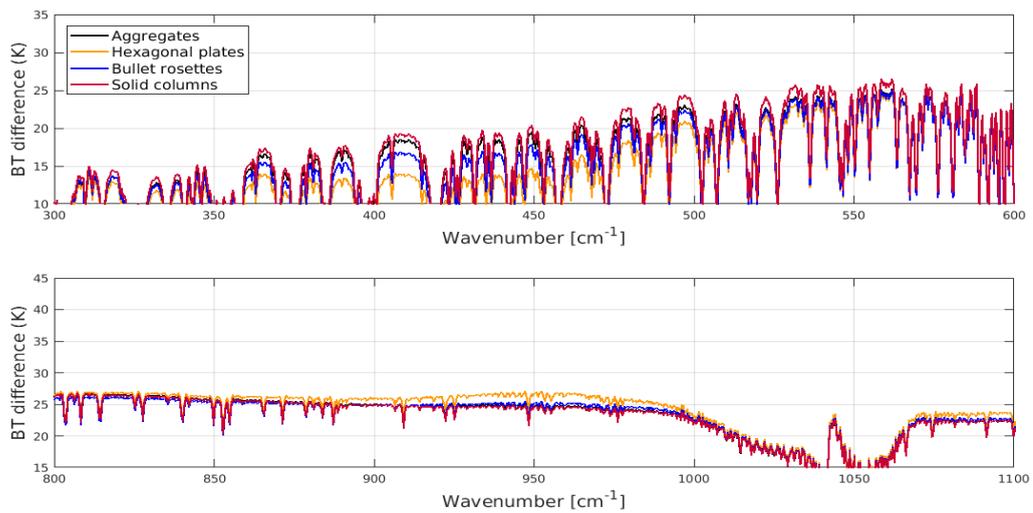


Figura 4.10: Quarta rappresentazione grafica del terzo studio di sensibilità. In questo caso, la dimensione efficace delle particelle è stata posta uguale a $100 \mu\text{m}$.

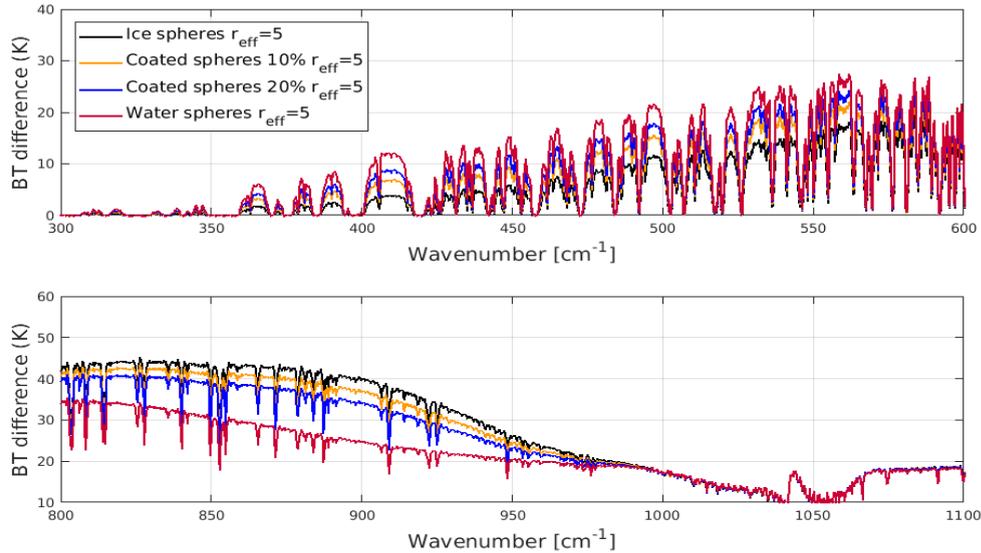


Figura 4.11: Rappresentazione grafica del quarto studio di sensibilità. In ordinata sono rappresentate le differenze di temperatura di brillantezza tra un caso di riferimento e due casi specifici e in ascissa i numeri d'onda in cm^{-1} . Il caso di riferimento è un cielo sereno della classe IG2 TRO NO WI NI con temperatura superficiale di 300.93 K. I casi specifici consistono in quattro atmosfere della classe IG2 TRO NO WI NI in cui è stato posto una nube di spessore ottico $OD(10\ \mu\text{m}) = 0.5$. In tutti e quattro i casi la nube è composta da sfere di raggio efficace pari a $5\ \mu\text{m}$, composte ora da ghiaccio (linea nera), ora da acqua e ghiaccio in diverse proporzioni (linea arancione), ora da acqua.

4.2.4 Quarto studio: sensibilità alla fase

Il quarto studio di sensibilità è incentrato sulle proprietà microfisiche delle nubi, e in particolare sullo studio dei segnali dovuti alla fase.

In questo studio di sensibilità sono state confrontate le differenze in temperature di brillantezza tra un caso di riferimento in cielo sereno (IG2 TRO NO WI NI, $T_{surf} = 300.93\ \text{K}$) e due casi specifici. I quattro casi specifici sono relativi a un cirro di spessore 0.5 km posto tra gli 8000 m e i 9000 m di spessore ottico $OD(10\ \mu\text{m}) = 2$. Nel primo caso, il cirro è composto da sfere di ghiaccio di raggio efficace pari a $5\ \mu\text{m}$. Nel secondo caso e nel terzo, il cirro è composto da sfere di ghiaccio e acqua di raggio efficace pari a $5\ \mu\text{m}$, dette sfere *coated* in gergo. Si tratta di sfere con un nucleo di ghiaccio rivestite da un involucro di acqua, che possono svilupparsi nel caso in cui si sciogla la parte esterna di una particella di ghiaccio. Nei nostri due casi, i rivestimenti d'acqua sono rispettivamente il 10% e il 20% sul raggio totale delle particelle. Nel quarto caso, la nube è posta sempre tra gli 8000 e i 9000 metri, è composta da sfere composte d'acqua e che hanno raggio efficace sempre di $5\ \mu\text{m}$.

Come si può osservare in figura 4.11, il segnale dato dai diversi tipi di sfere è ben riconoscibile. È importante notare che è più arduo ricavare le proprietà di nubi relativamente basse, come quelle nel presente caso studio, perché la loro temperatura è più simile a quella della superficie. Quando si desidera identificare nubi composte da particelle *coated* questa difficoltà diventa intrinseca: tutte le nubi composte da tali particelle sono abbastanza basse di quota. Questo perché se la temperatura scende sotto i $-40\ ^\circ\text{C}$ (che nel caso studio IG2 TRO NO WI NI avviene a una quota di 10 km) tutte le particelle d'acqua congelano a causa della nucleazione omogenea.

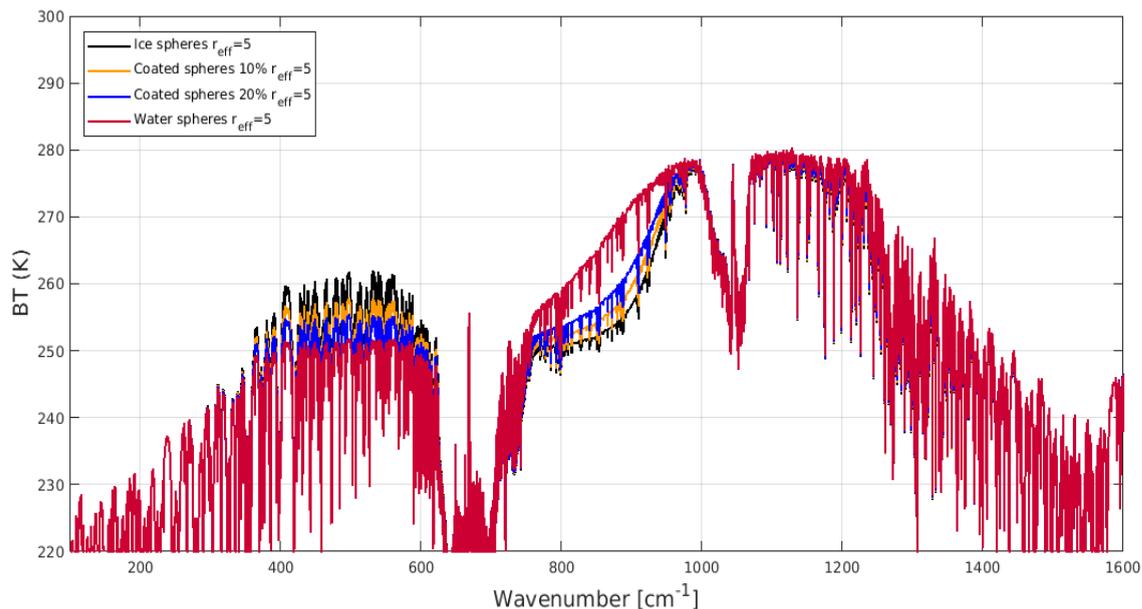


Figura 4.12: I quattro spettri relativi al caso studio analizzato.

Come si può osservare nella figura 4.11, **il segnale dato dalle nubi composte da particelle d'acqua o coated è più forte di quello dato dal ghiaccio nel lontano infrarosso**. Questo risultato è del tutto atteso, dato l'andamento delle parti immaginarie degli indici di rifrazione dell'acqua e del ghiaccio o (figura 4.5). Si noti che intorno ai 400 cm^{-1} le parti immaginarie dei due indici di rifrazione differiscono in modo notevole, con quello dell'acqua in fase liquida molto maggiore di quello dell'acqua in fase solida: **ci si aspetta quindi grandi differenze tra i due segnali in questa porzione dello spettro. È tuttavia vero che l'assorbimento atmosferico dovuto alla banda rotazionale del vapore acqueo ha una notevole influenza sul segnale**, dato che le nubi si trovano a quote relativamente basse. Nel FIR ritroviamo quindi dei segnali relativamente deboli. Le differenze tra i vari segnali risultano comunque importanti.

Come si può notare confrontando la figura 4.13 e la figura 4.5, la parte immaginaria dell'indice di rifrazione ha un effetto dominante nel determinare i coefficienti di estinzione delle distribuzioni. Questo fatto è particolarmente evidente perché le particelle utilizzate per effettuare le simulazioni sono molto piccole, e come è stato dimostrato nel precedente studio di sensibilità i coefficienti di assorbimento di particelle piccole sono molto più sensibili alla parte immaginaria dell'indice di rifrazione. Come si può evincere dalla figura 4.11, questa notevole sensibilità permette il discernimento di particelle con vari *coating* (10% e 20%), grazie al fatto che il segnale è più elevato dell'errore di misura. D'aiuto è anche il fatto che il segnale dovuto a una nube di ghiaccio è più alto di quello dovuto alla nube d'acqua nel MIR, ma è più debole nel FIR.

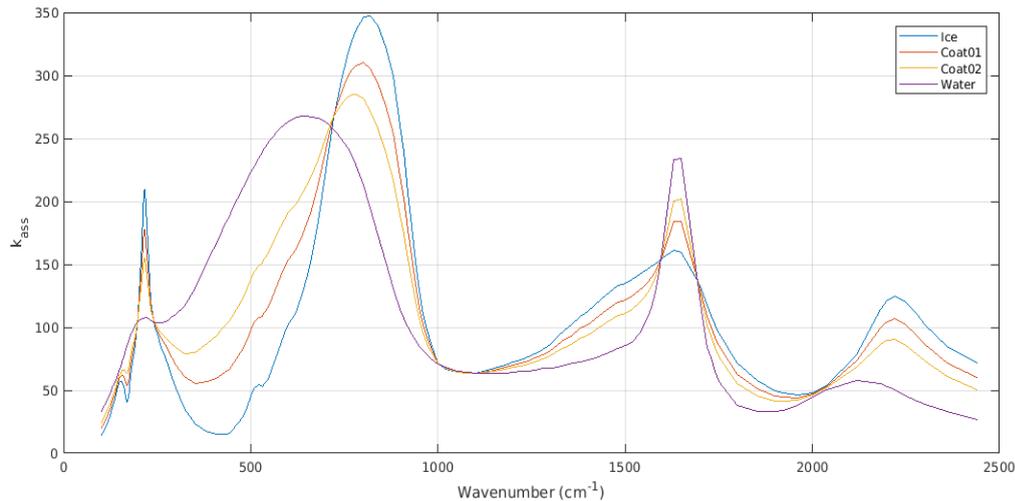


Figura 4.13: Coefficienti di assorbimento $k_{0,ss}$ per la distribuzione SYspIce02r05v01 (linea azzurra) relativa alle sfere di ghiaccio, SYctd01r03v01 (linea rossa) e SYctd02r05v01 (linea gialla) relative alle sfere coated, e SYspWatr05v01 (linea viola) relativa alle sfere d'acqua.

4.3 ICICLE

In questi paragrafi saranno illustrati il concepimento e i lineamenti del funzionamento del codice di identificazione e classificazione delle nubi sviluppato dal sottoscritto, vale a dire ICICLE.

La filosofia che ha guidato lo sviluppo di questo codice è la stessa del *remote sensing*. L'obiettivo è sottoporre gli spettri simulati per RFTS a una rielaborazione di stampo semi-empirico per ottenere una stima del valore di determinate variabili atmosferiche. Le variabili su cui si è incentrato il presente lavoro sono le seguenti:

1. La presenza o l'assenza di copertura nuvolosa.
2. La presenza di cirri *subvisible* ($OD < 0.03$).
3. Lo spessore ottico delle nubi.
4. La dimensione dei cristalli di ghiaccio.
5. L'*habit* dei cristalli di ghiaccio.

Nel concepire ICICLE si è tenuto conto del fatto che, di volta in volta, l'utente potrebbe desiderare effettuare l'identificazione di una variabile diversa. Per questo motivo la struttura di ICICLE non favorisce una particolare variabile e permette all'utilizzatore di scegliere quali informazioni estrarre. Come avviene nel *remote sensing* nell'infrarosso, le informazioni utilizzate dal codice sono le temperature di brillantezza relative ai canali di RFTS. Sta all'utente scegliere con buon senso quali canali utilizzare per effettuare l'identificazione della variabile desiderata, anche facendo riferimento agli studi di sensibilità. Nel caso in cui si desiderasse classificare le nubi secondo la distribuzione dimensionale dei cristalli che le compongono, è vivamente consigliato includere canali relativi alla finestra principale dell'infrarosso, dove la sensibilità alla distribuzione dimensionale è massima, ma anche altri canali dove tale sensibilità è pressoché nulla, cosicché il codice possa distinguere il segnale legato alla distribuzione dimensionale

da segnali che hanno un'origine diversa.

Prima di illustrare nel dettaglio la struttura e il funzionamento di ICICLE, è necessario descrivere il modello matematico che sta alla base del processo di classificazione, vale a dire la *Support Vector Machine*.

4.3.1 Support Vector Machine: trattazione intuitiva

La Support Vector Machine è l'algoritmo ad apprendimento automatico su cui si basa ICICLE. **La Support Vector Machine è un classificatore di tipo binario.** In altri termini, tramite la Support Vector Machine possono essere distinte due classi di dati alla volta. Ciò nondimeno, **esistono modelli che sfruttano la Support Vector Machine in grado di creare classificatori di ordine arbitrario**, come quello utilizzato nel presente lavoro. La Support Vector Machine non è un algoritmo di tipo probabilistico, perché alla classificazione non è associata una probabilità.

La classificazione determinata dalla Support Vector Machine si divide in due fasi. **La prima, che corrisponde alla creazione del modello, è detta *training*.** **La seconda, che corrisponde alla classificazione dei dati secondo tale modello, è detta *testing*.** La prima fase coinvolge solitamente un piccolo sottoinsieme dei dati disponibili, detto *training set*. La seconda fase, invece, coinvolge una porzione molto più grande, detta *test set*. **La classe di appartenenza di ogni elemento del *training set* è nota.**

La creazione del modello avviene nel seguente modo. Anzitutto, si prende in considerazione lo *spazio delle feature*. Nel nostro caso, le *feature* sono le temperature di brillanza relative ai canali di RFTS. Ogni dato del nostro *training set* può essere posizionato all'interno dello *spazio delle feature*. Nel nostro caso, i dati corrispondono agli spettri simulati per RFTS.

Dato che **nel nostro caso lo *spazio delle feature* è in circa 5000 dimensioni (cioè il numero di canali di RFTS)**, è sconsigliato utilizzarlo a scopo didattico. Per illustrare il funzionamento delle Support Vector Machine, si prenderà come esempio uno spazio delle feature bidimensionale.

Si osservi la figura 4.14. In tale figura è stato creato un modello per la classificazione di due gruppi di elementi attraverso un *training set* di otto elementi, di cui già si conosce l'appartenenza a l'una o all'altra classe. **Il modello consiste nella retta arancione che divide i due insiemi di elementi.** Se si desiderasse classificare gli elementi presenti all'interno del *test set*, la procedura sarebbe semplice. Se un elemento cade al di sopra della retta arancione, si dirà che esso appartiene alla prima classe (quella dei cieli sereni). Viceversa, si dirà che appartiene alla seconda classe (quella dei cieli nuvolosi). **Nel caso in cui fosse nota l'appartenenza degli spettri del *test set* a una delle due classi, sarà possibile valutare l'accuratezza del modello calcolando il rapporto tra spettri classificati bene e il totale degli spettri presenti all'interno del *test set*:**

$$\text{Accuratezza} = \frac{\text{casi ben classificati}}{\text{dimensione test set}}$$

In generale, **si valuta l'accuratezza del modello soltanto per effettuare delle prove e non nella fase di classificazione vera e propria.** Questo perché l'accuratezza può essere valutata soltanto se è nota a priori la classe di appartenenza degli spettri. Nel nostro caso, dato che abbiamo effettuato delle simulazioni attraverso un modello diretto, le condizioni a priori ci sono note. Questo ci permette di testare il modello con numerosi parametri per verificare l'opportunità del suo uso in situazioni.

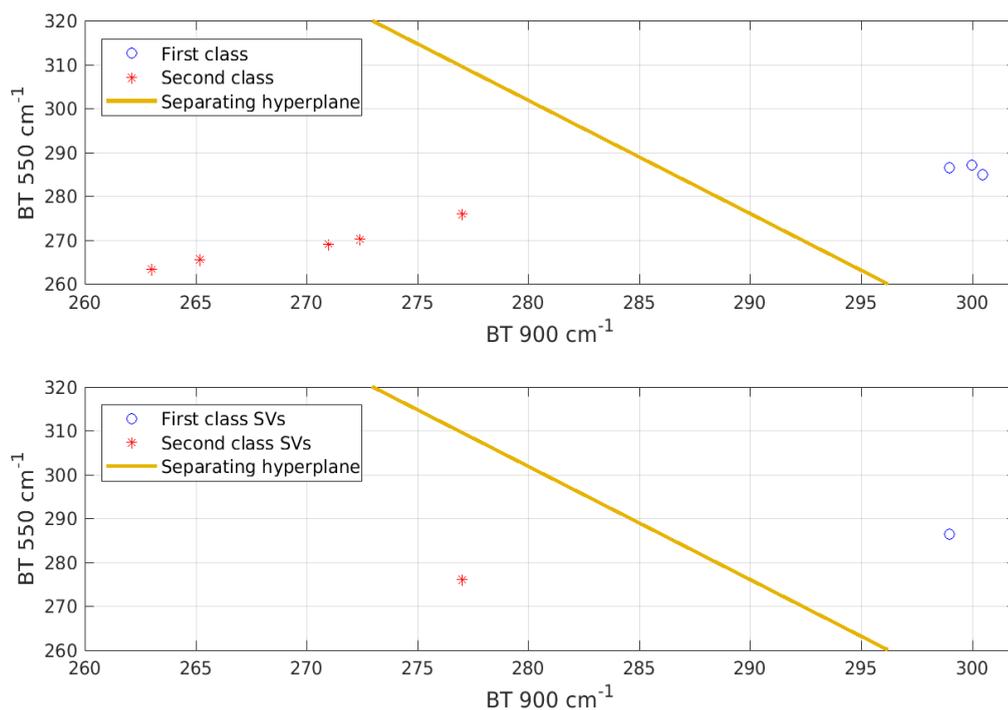


Figura 4.14: Esempio di creazione di un modello per la classificazione tramite Support Vector Machine. Lo spazio delle feature è bidimensionale. La prima feature è la temperatura di brillanza a 550 cm^{-1} (nella banda rotazionale del vapore acqueo) e l'altra è la temperatura di brillanza a 900 cm^{-1} (nella finestra principale dell'infrarosso). I dati appartenenti alla prima classe sono rappresentati in entrambi i pannelli in blu, mentre i dati appartenenti alla seconda classe sono rappresentati in rosso. La prima classe rappresenta cieli sereni, mentre la seconda rappresenta cieli nuvolosi. Nel pannello superiore sono rappresentati tutti gli elementi del *training set*, mentre nel pannello inferiore sono rappresentati soltanto i *Support Vector*.

Per quanto riguarda la classificazione offerta dalla Support Vector Machine, **esistono due casistiche e due modalità di classificazione**. Prima di tutto, il *training set* può e può non essere *separabile linearmente* (**prima e seconda casistica**). Si dice che il *training set* è **separabile linearmente** se esiste un iperpiano nello spazio delle *feature* che divide il *training set* in accordo all'appartenenza degli elementi che lo compongono alle due classi. Nel caso esemplificativo esposto in figura 4.14, il *training set* è separabile linearmente nello spazio bidimensionale illustrato. Infatti, esiste un iperpiano (una retta) che divide il *training set* in accordo all'identità dei suoi elementi. **A volte, tuttavia, il *training set* non è separabile linearmente**. Anzi, questo caso è molto frequente, anche nell'ambito dell'identificazione e della classificazione delle nubi studiato nel presente lavoro. Il fatto che la Support Vector Machine sia in grado di trattarlo rende l'algoritmo molto adeguato ai nostri scopi.

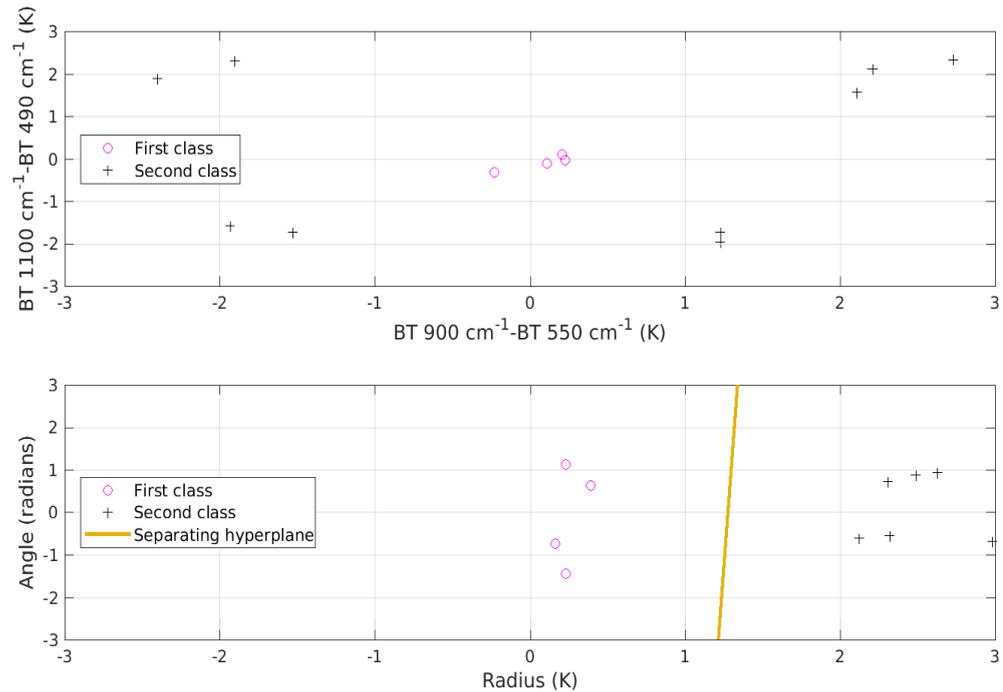


Figura 4.15: Esempio di *training set* non separabile linearmente. Lo spazio delle feature è bidimensionale. La prima *feature* è la differenza tra le temperature di brillantezza a 900 cm⁻¹ e a 550 cm⁻¹. La seconda *feature* è differenza tra le temperature di brillantezza a 1100 cm⁻¹ e a 490 cm⁻¹. La prima classe rappresenta cieli coperti da nubi alte e spesse (punti rosa), mentre la seconda classe rappresenta altri casi (punti neri). Nel pannello superiore è rappresentato il problema nello spazio cartesiano originario, mentre nel pannello inferiore il problema è rappresentato nello spazio delle coordinate polari.

Per studiare un caso non separabile linearmente, si osservi la figura 4.15. Gli elementi posti al centro del pannello superiore rappresentano spettri in cielo nuvoloso, coperto da nubi alte e spesse. Infatti, se il cielo è coperto, le temperature di brillantezza in regioni spettrali sufficientemente trasparenti sono molto simili, vicine alla temperatura della nube. Viceversa, se il cielo non è coperto da nubi spesse, le differenze tra le temperature di brillantezza può assumere diversi valori. In tale situazione i dati **non sono linearmente separabili**, perché non esiste una retta che divida il *training set* in accordo all'identità dei suoi elementi: **alcuni spettri cadono sempre sul lato sbagliato della retta**.

È legittimo domandarsi come risolvere questo problema. La risposta è semplice: **il problema posto nello spazio delle feature originario deve essere spostato in uno spazio delle feature nuovo**. Nel nostro caso, effettuando una trasformazione da coordinate cartesiane in coordinate polari, gli elementi del *training set* divengono linearmente separabili (pannello inferiore della figura 4.15). In ogni caso, è **anche possibile creare un modello senza trasformare lo spazio delle feature**. Invece di utilizzare la classificazione *a margine duro* (**prima modalità di classificazione**), in cui non si ammette l'esistenza di un modello se gli insiemi non sono linearmente separabili, è possibile sfruttare la classificazione *a margine morbido* (seconda modalità di classificazione). In questo modo, si ammette che alcuni elementi del *training set* possano trovarsi sul lato sbagliato dell'iperpiano che divide le classi. Questo argomento sarà trattato esaurientemente nel prossimo paragrafo.

4.3.2 Support Vector Machine: trattazione matematica

Le Support Vector Machine risolvono un problema di minimizzazione.

Come si è già evidenziato nella sezione precedente, lo scopo è trovare un iperpiano che divida il *training set* nel miglior modo possibile. Nel caso in cui il *training set* sia linearmente separabile, il problema si riduce alla ricerca di un iperpiano equidistante dai due sottoinsiemi del *training set* e la cui distanza da tali sottoinsiemi sia massima. In questo caso, la risoluzione del problema è data dai pochi elementi che determinano l'equazione dell'iperpiano, i più vicini a esso. Tali elementi del *training set* sono detti *Support Vector*. Nell'esempio fatto nel paragrafo precedente, i *Support Vector* sono indicati nel pannello in basso in figura 4.14.

Da un punto di vista matematico, l'iperpiano ottimale può essere descritto tramite la seguente equazione:

$$\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b = 0 \quad (4.1)$$

Dove \mathbf{x} è un punto appartenente all'iperpiano, \mathbf{w}^\top è un vettore normale all'iperpiano e b è il cosiddetto *bias*. Dato che il modulo di \mathbf{w}^\top può variare liberamente, si può imporre che in corrispondenza dei *Support Vector* della prima classe passi un iperpiano di equazione:

$$\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b = 1 \quad (4.2)$$

e che, analogamente, in corrispondenza dei *Support Vector* della seconda classe passi un iperpiano di equazione:

$$\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b = -1 \quad (4.3)$$

La scelta dei valori a secondo membro (1 nella prima equazione, -1 nella seconda) è fatta per comodità. Dato che i *Support Vector* sono gli elementi più vicini all'iperpiano, abbiamo che un elemento \mathbf{x}_i che rispetti l'equazione $\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b \geq 1$ appartiene alla prima classe. Un elemento \mathbf{x}_j che rispetti l'equazione $\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_j + b \leq -1$ appartiene invece alla seconda classe. Il parametro classificatore è quindi *segno*($\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b$): il suo valore indica a quale classe appartiene un dato elemento \mathbf{x} . Se indichiamo con y_i l'etichetta associata a un certo elemento, con $y_i = 1$ per elementi appartenenti alla prima classe e $y_i = -1$ per elementi appartenenti alla seconda classe, otteniamo una condizione generale che deve essere soddisfatta dai punti del *training set*:

$$y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq 1 \quad (4.4)$$

Torniamo al problema di minimizzazione. La distanza tra i due iperpiani è data dall'equazione:

$$D = \frac{2}{|w|}$$

Dato che il nostro scopo è massimizzare la distanza tra i due iperpiani, dobbiamo minimizzare $|w|$. Dobbiamo risolvere un problema di minimizzazione, in cui i segni non sono rilevanti per la presenza del valore assoluto. Conviene definire una funzione definita positiva, detta *Lagrangiana*:

$$L(w) = \frac{1}{2}|w|^2 \quad (4.5)$$

Il nostro scopo è minimizzare tale Lagrangiana, con le condizioni date nell'equazione 4.4. Questo nel caso in cui il *training set* sia linearmente separabile.

In caso contrario, è necessario modificare le condizioni dell'equazione 4.4, che non possono valere se il *training set* non è linearmente separabile. È inoltre necessario aggiungere un termine nuovo alla Lagrangiana.

Per modificare tali condizioni, definiamo una funzione detta *hinge loss function* nella letteratura. Tale funzione è definita come segue:

$$\chi_i = \max(0, 1 - y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b)) \quad (4.6)$$

Dato che per un elemento collocato sul lato giusto del margine vale $y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b) \geq 1$ (equazione 4.4, χ_i vale 0 per ogni elemento del *training set* ben collocato. Agli elementi mal collocati, invece, corrisponderà un valore di χ_i superiore a 0. Dal punto di vista intuitivo, tali elementi ostacolano la classificazione. Devono far sì che la minimizzazione della Lagrangiana sia più difficoltosa, per cui devono aumentarne il valore. Nel problema a margine morbido, la Lagrangiana si scrive come segue:

$$L(w, \chi_i) = \frac{1}{2}|w|^2 + C \sum_{i=1}^n \chi_i \quad (4.7)$$

$$\text{con } y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \chi_i$$

Che sono automaticamente rispettate, nel caso in cui l'elemento del *training set* sia mal collocato.

Gli elementi che determinano l'esito della classificazione sono tutti quelli che hanno un ruolo nella minimizzazione della Lagrangiana. Questo è valido per tutti gli elementi per cui $\chi_i \neq 0$, ovvero per gli elementi per cui vale $y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b) \leq 1$. Tra questi sono compresi gli elementi che cadono all'interno del margine determinato dai due iperpiani definiti nelle equazioni 4.2 e 4.3, nonché tutti gli elementi collocati sul lato sbagliato dell'iperpiano. L'insieme di tutti questi elementi è l'insieme dei *Support Vector* nel problema a margine morbido. Tanto maggiore è il numero dei Support Vector, tanto più è dubbia la classificazione.

Descriviamo infine come effettuare la classificazione in uno spazio vettoriale nuovo, fatto necessario per risolvere il problema posto in figura 4.15. In questo caso, si effettua la minimizzazione nel nuovo spazio delle *feature*. Per farlo, è necessario definire una funzione di trasformazione ϕ e sostituire $\phi(x_i)$ a $\phi(x)$ in tutte le equazioni precedenti. Otteniamo:

$$L(w, \chi_i) = \frac{1}{2}|w|^2 + C \sum_{i=1}^n \chi_i \quad (4.8)$$

$$\text{con } y_i(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_i) + b) \geq 1 - \chi_i$$

dove C è un parametro detto *costo*, che determina il peso da dare alla *hinge loss function*. Più il valore dato al parametro è elevato, maggiore sarà l'ostacolo alla minimizzazione della Lagrangiana. A un valore di costo infinito corrisponde il problema a margine duro, ovvero quello descritto dall'equazione 4.5, che non ammette soluzioni se esiste un elemento del *training set* per cui $\chi_i \geq 0$.

A questo punto, conviene esprimere la Lagrangiana e i vincoli di in una nuova forma tramite gli strumenti offerti dalla cosiddetta *teoria della dualità*, sulla quale non ci soffermeremo. La risoluzione del problema duale, con una nuova Lagrangiana e dei nuovi vincoli, offre un limite inferiore alla soluzione del problema originario. Fatte queste premesse, possiamo scrivere la Lagrangiana e i vincoli in forma duale, senza addentrarci nella dimostrazione:

$$L(w) = \sum_{i=1}^n c_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i c_i (\phi(x_i) \cdot \phi(x_j)) y_j c_j \quad (4.9)$$

$$\text{con } \sum_{i=1}^n c_i y_i e \quad 0 \leq c_i \leq \frac{C}{2n}$$

dove i c_i sono determinati dall'equazione:

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^n c_i y_i \phi(\mathbf{x})$$

Tramite l'espressione del problema in forma duale, si può sfruttare il cosiddetto trucco del kernel (*kernel trick* in letteratura). In pratica, il prodotto scalare $\phi(x_i) \cdot \phi(x_j)$ che appare nell'equazione 4.9 può essere riscritto sotto forma di una funzione del tutto arbitraria, detta kernel:

$$k(x_i, x_j) = \phi(x_i) \cdot \phi(x_j)$$

Il parametro classificatore è:

$$\text{segno}(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_i) + b) = \text{segno}\left(\sum_{i=1}^n c_i y_i k(x_i, x_j) + b\right)$$

Il vantaggio di questa operazione è la possibilità di risolvere il problema di minimizzazione senza dover conoscere la funzione di trasformazione ϕ , di fatto evitando di calcolare esplicitamente le coordinate degli elementi nel nuovo spazio delle feature. Infatti, viene solo il loro prodotto interno $k(x_i, x_j)$, **operazione computazionalmente molto più economica**. Nel presente lavoro, saranno utilizzati il kernel lineare, **adatto per la classificazione di dati quasi linearmente separabili**:

$$k_{lin}(x_i, x_j) = x_i^\top x_j \quad (4.10)$$

e il kernel gaussiano, **adatto per la classificazione di dati distribuiti in modo simile a quelli riportati in figura 4.15**:

$$k_{gauss}(x_i, x_j) = \exp(-\gamma(|x_i - x_j|)^2) \quad (4.11)$$

Qui si conclude la nostra breve discussione matematica sulle Support Vector Machine. Nei prossimi paragrafi, sarà descritto il funzionamento del codice ICICLE.

4.3.3 ICICLE: una panoramica

ICICLE è stato scritto in Matlab, un famoso, diffuso e flessibile linguaggio di programmazione di tipo interpretativo. La scelta è ricaduta su Matlab per numerosi motivi. Anzitutto, si tratta di un linguaggio di programmazione di livello molto alto. Esso dispone di una grande quantità di funzioni, che permettono una agevole manipolazione degli array numerici, delle stringhe e dei file tramite interfacce molto intuitive. Inoltre, essendo Matlab un linguaggio interpretativo, non è necessaria la compilazione per individuare errori nel codice. Il *debugging* risulta quindi molto rapido. All'interno del presente lavoro si è dedicato amplissimo spazio alla descrizione di ICICLE, dato che i risultati ottenuti tramite di esso costituiscono il cuore della tesi. Per alleggerire il lettore, nel corpo della tesi è stata inserita solo una descrizione a grandi linee di ICICLE, mentre una descrizione più approfondita è stata inserita nell'appendice B.

Passiamo alla descrizione del codice. Per una lettura più agevole da parte degli utenti, ICICLE è stato suddiviso in un ampio numero di subroutine, ciascuna delle quali esegue un compito preciso. ICICLE fa inoltre uso di alcune funzioni sviluppate da ricercatori esterni al progetto Matlab, tra le quali *svmtrain* e *svmpredict*, elementi cardine del processo di classificazione degli spettri. Più precisamente, ICICLE è composto dalle seguenti routine:

1. *ICICALL*, il corpo del codice. Essa ha il compito di coordinare le operazioni svolte dal codice. Tramite ICICALL si assegnano le locazioni di memoria agli array principali, si definiscono i percorsi dei file che contengono gli spettri, si scrivono alcuni file e si chiamano le varie subroutine. I file contenenti gli spettri dovranno essere inseriti all'interno di una cartella di lavoro definita nel file Input.dat o in una sua *subdirectory*. Tali file dovranno essere della forma **.rad*.
2. *Lettura degli Input*, la prima subroutine chiamata da ICICLE. Il suo compito è quello di leggere i contenuti del file Input.dat, che si trova nella stessa cartella del codice. All'interno di tale file sono presenti numerose impostazioni decidibili dall'utente, come i canali di RFTS da utilizzare per la classificazione, il numero di classi in cui suddividere gli spettri, il valore dell'errore relativo gaussiano da aggiungere ai dati simulati, e molto altro. Alla data dell'ultimo aggiornamento del codice (28 agosto 2017) sono presenti 32 impostazioni all'interno del file Input.dat.
3. *Conteggio Classi*, la seconda subroutine chiamata da ICICLE. Tale subroutine ha il compito di contare il numero di spettri appartenenti a ciascuna classe secondo il criterio definito nel file Input.dat dall'utente. Tale conteggio viene effettuato per assegnare a determinate matrici la locazione di memoria che occorre loro e per calcolare alcuni parametri utili alla fase di classificazione.
4. *Lettura e Conversione*, la terza subroutine chiamata da ICICLE. Il compito di tale subroutine è leggere i dati presenti all'interno dei file **.rad*, che contengono gli spettri sotto forma di radianze, e di convertire tali dati in temperature di brillantezza. Prima della conversione, se specificato nel file Input.dat, alle radianze viene aggiunto un errore relativo di tipo gaussiano. Tale errore potrà essere ridotto effettuando una media su un certo numero di canali, se indicato nel file Input.dat.
5. *Suddivisione*, la quarta subroutine chiamata da ICICLE. Tale subroutine, come suggerisce il nome, suddivide i vettori di temperature di brillantezza in classi e raggruppa tali vettori in matrici distinte. Il codice mette inoltre in atto una procedura di selezione affinché il training set sia rappresentativo dell'insieme di tutti gli spettri.
6. *Ricerca delle Corrispondenze*, la quinta subroutine chiamata da ICICLE. Il compito precipuo di *Ricerca delle corrispondenze* è quello di creare un file di testo che indichi se un dato spettro ha fatto parte del *training set* o del *test set*). Inoltre, se lo spettro faceva parte del test set, *Ricerca delle*

corrispondenze scrive se è stato classificato correttamente, erroneamente o se la sua classificazione è stata incerta.

7. *Support Vector Machine*, la sesta subroutine chiamata da ICICLE. In questa subroutine viene effettuata la classificazione dei vettori contenenti le temperature di brillantezza, secondo una serie di criteri decisi nel file *Input.dat*. La classificazione avviene tramite un algoritmo ad apprendimento automatico, la *Support Vector Machine* appunto, il cui funzionamento è stato illustrato nei paragrafi precedenti. **Solo e soltanto in questa subroutine viene utilizzata la teoria esposta nella sezione 4.3.2.**
8. *Ottimizzazione*, la prima subroutine chiamata da *Support Vector Machine*. Tale subroutine, cruciale nell'operazione di classificazione, seleziona la combinazione di k feature ottimale sulle n totali secondo un criterio definito internamente al codice. Le feature possono essere **le temperature di brillantezza** relative a certi canali RFTS o **le differenze tra tali temperature di brillantezza**, a seconda delle impostazioni fornite dall'utente nel file *Input.dat*. **L'ottimizzazione è del tutto indipendente dalla procedura di classificazione**(per ulteriori dettagli, si consulti l'Appendice tecnica B).
9. *Plot Accuratezze*, la settima subroutine chiamata da ICICLE. Essa fornisce la rappresentazione grafica dell'accuratezza delle classificazioni. Tale accuratezza viene disegnata in base al numero di canali e alla porzione di spettro utilizzata (MIR o infrarosso intero) in due pannelli distinti del medesimo grafico.
10. *Scatter plot*, l'ottava subroutine chiamata da ICICLE. Essa fornisce la rappresentazione grafica dell'andamento del run sotto forma di scatter plot. Le ascisse e le ordinate di tali scatter plot sono differenze in temperature di brillantezza tra canali scelti dall'utente nel file *Input.dat*. In ciascun grafico sono presenti due pannelli. Nel pannello superiore sono rappresentati gli spettri classificati correttamente. Viceversa, nel pannello inferiore sono rappresentati gli spettri classificati erroneamente.

Vale la pena sottolineare che ICICLE, **in un solo run, può effettuare più di un ciclo di classificazioni**, se le impostazioni nel file *Input.dat* lo indicano. Ad esempio, nello stesso run possono essere effettuate due classificazioni, una utilizzando 20 canali e una utilizzando solo 10 canali.

ICICLE, a ogni run, produce numerosi file di output:

1. I file *BTclass*.dat*, che contengono le matrici di temperature di brillantezza già rimescolate dal codice. Tali file non saranno prodotti se l'utente impone nel file *Input.dat* di utilizzare matrici già esistenti.
2. Il file *Classi.dat*, dove sono registrate le identità delle classi del run.
3. Il file *Informazioni accuratezze.dat*, dove sono salvati i dati numerici delle *accuratezze relative* per ogni ciclo del run. Per la definizione di accuratezze relative, si legga poco più in basso.
4. Una copia del file *Input.dat*.
5. m cartelle, una per ogni ciclo di classificazioni, all'interno di ciascuna delle quali sono presenti due file:
 - (a) Il file *Informazioni combinazione ottimale.dat*, dove sono registrate le identità delle feature utilizzate nel run.

- (b) Il file *Corrispondenze.dat*, dove sono registrate numerose informazioni sui singoli spettri. Si può osservare a quale classe è appartenuto lo spettro nel run (*training set, test set,...*) e se lo spettro è stato classificato bene o meno.

Tutti questi file vengono salvati in una cartella che identifica il run. Anche i grafici prodotti vengono salvati in tale cartella tramite una routine separata di ICICLE.

Come si può osservare, gli output di ICICLE contengono un grande numero di informazioni. Non solo è possibile osservare l'andamento dell'accuratezza del modello in funzione del numero di *feature* utilizzate grazie all'ausilio dei grafici, **ma si può anche determinare quali sono le feature che contengono più informazioni, quali spettri sono stati classificati erroneamente, e molto altro.**

Dato che ICICLE è un programma piuttosto complesso, è importante comprendere il funzionamento di ciascuna subroutine nel dettaglio perché i risultati che saranno mostrati nella prossima sezione appaiano chiari. È quindi vivamente consigliata al lettore la consultazione dell'Appendice tecnica B.

Alcune definizioni sono tuttavia assolutamente imprescindibili per la comprensione dei risultati ottenuti tramite ICICLE, per cui saranno riportate nel corpo del testo. Una di queste è *accuratezza della classificazione*, parametro fondamentale sulla base del quale si determina la bontà del risultato finale. **Ci sono due tipi di accuratezza: l'accuratezza assoluta e l'accuratezza relativa a una classe.** L'accuratezza assoluta è il rapporto tra gli spettri classificati bene e il totale degli spettri all'interno del test set:

$$ACC_{\text{ass}} = \frac{\text{Spettri ben classificati}}{\text{Numero spettri nel test set}}$$

L'accuratezza relativa a una classe è invece il rapporto tra gli spettri appartenenti a una classe classificati bene e il rapporto di tutti gli spettri appartenenti a tale classe presenti nel test set:

$$ACC_{\text{rel}}(\text{classe } x) = \frac{\text{Spettri ben classificati della classe } x}{\text{Numero spettri della classe } x \text{ nel test set}}$$

È chiaro che **alti valori dell'accuratezza assoluta non necessariamente corrispondono ad alti valori dell'accuratezza relativa a tutte le classi.** Se ad esempio su 950 spettri in cielo nuvoloso 940 vengono classificati bene e su 50 spettri in cielo sereno 10 vengono classificati bene, l'accuratezza assoluta sarà del 95% ($ACC_{\text{ass}} = \frac{940+10}{950+50} = 95\%$) ma l'accuratezza relativa alla classe dei cieli sereni sarà del 20% ($ACC_{\text{rel}}(\text{cieli sereni}) = \frac{10}{50} = 20\%$), per cui la nostra classificazione è stata di scarsa qualità per quanto riguarda questa classe. **È importante sottolineare che ICICLE prevede anche l'esclusione dalla classificazione alcuni casi ben classificati ma molto vicini all'iperpiano ottimale**, che saranno detti nel presente lavoro *casi non classificati*. Le accuratezze calcolate da ICICLE tengono conto di questo fatto. Tutti questi concetti sono ribaditi e approfonditi nell'Appendice tecnica B.

Si tenga comunque conto che **non può esistere una definizione univoca della bontà della classificazione.** Supponiamo ad esempio che tramite la nostra classificazione fossimo interessati ad ottenere un nuovo campione di cieli nuvolosi, identificando quelli presenti nel test set, per ampliare un nostro dataset di spettri relativi a cieli nuvolosi. Il nostro obiettivo è essere certi che il nostro modello etichetti come nuvolosi solo e soltanto gli spettri relativi a cieli nuvolosi. **Per raggiungere questo**

obiettivo, paradossalmente, si deve massimizzare l'accuratezza relativa ai cieli sereni. Infatti, se l'accuratezza relativa ai cieli sereni è massima, il rischio che uno spettro relativo a un cielo sereno sia erroneamente etichettato come nuvoloso è minimo. **Non avrebbe importanza se l'accuratezza relativa alla classe dei cieli nuvolosi fosse ad esempio del 10%:** per i nostri scopi, la classificazione sarà andata a buon fine e **il parametro che determinerà la bontà della classificazione nel nostro caso sarà l'accuratezza relativa alla classe dei cieli sereni.** Se invece fossimo interessati a classificare quanto meglio entrambe le classi, **il parametro che determinerà la bontà della classificazione sarà il minimo tra i due valori di accuratezza relativa alle classi studiate.** In ICICLE si è tenuto conto di questa ambiguità: **tramite un'opzione nel file Input.dat, è possibile selezionare il criterio per la bontà della classificazione.** È possibile massimizzare una singola accuratezza oppure la somma di tutte le accuratezze. Ulteriori informazioni su questi concetti possono essere trovate nell'Appendice tecnica B.

Data la presenza di casi esclusi dalla classificazione, si rende necessaria la distinzione tra *accuratezza complessiva* e *accuratezza selettiva*. Se l'accuratezza complessiva è il rapporto tra il numero di spettri ben classificati e il numero di spettri nel test set, l'accuratezza selettiva è il rapporto tra il numero degli spettri ben classificati e il totale degli spettri presenti nel test set, tranne quelli esclusi dalla classificazione:

$$ACC_{sel} = \frac{\text{Spettri ben classificati}}{\text{Numero spettri nel test set} - \text{Numero spettri non classificati}}$$

L'attuale versione di ICICLE **non fa uso dell'accuratezza selettiva, ma dell'accuratezza complessiva.**

4.3.4 Debolezze del programma

Nonostante la sua versatilità e la sua potenza, ICICLE presenta delle debolezze e delle mancanze.

La principale debolezza di ICICLE sono le importanti conseguenze dell'arbitrarietà di alcuni parametri, **completamente regolabili dall'utente nel file Input.dat.** Questa libertà da un lato permette all'utente di adattare il codice a una moltitudine di classificazioni diverse. D'altra parte, **c'è un elevato rischio di interpretare male i risultati prodotti dal codice se non si conosce in modo approfondito la teoria sottostante.**

Un'importante mancanza di ICICLE è l'assenza nel file Input.dat di un'opzione che permetta all'utente di scegliere la composizione del training set, del test set di ottimizzazione e del test set vero e proprio. **Allo stato attuale, infatti, è possibile scegliere soltanto quanti elementi di ciascuna classe faranno parte di ciascun dataset, e non quali.** La possibilità di scegliere la composizione dei vari insiemi ridurrebbe il *bias* nelle classificazioni. Ad esempio, l'utente potrebbe decidere di includere nel training set un numero di casi esiguo ma molto differenziati, cosicché le classificazioni risultino migliori.

Nella prossima sezione, dove saranno esposti i risultati prodotti da ICICLE per alcuni casi studio, è opportuno che il lettore tenga conto delle limitazioni di ICICLE appena esposte per una migliore comprensione di quanto si affermerà.

Sezione 5

Risultati

5.1 Introduzione

La messa a punto di ICICLE è stata la preoccupazione principale del presente lavoro. Prima che ICICLE potesse dirsi operativo sono state necessarie lunghe fasi di test, si sono dovute introdurre numerose modifiche e opzioni aggiuntive ed è stato necessario verificare il corretto funzionamento del programma quali che fossero le impostazioni introdotte tramite il file `Input.dat`. Dopo lunghe sessioni di lavoro, ICICLE può ora dirsi funzionante. I risultati più rilevanti ai fini del presente lavoro saranno illustrati nei prossimi paragrafi.

Come abbiamo visto nella sezione precedente, ICICLE è altamente flessibile e dispone di numerose impostazioni regolabili liberamente dall'utente. Ciascuna di queste impostazioni deve essere inserita cautamente, perché le classificazioni date dal codice dipendono fortemente dalle scelte iniziali. Infatti, anche se l'insieme di spettri fosse lo stesso, le accuratze delle classificazioni prodotte da ICICLE potrebbero variare notevolmente a seconda delle impostazioni. In particolare, hanno un notevole influsso le seguenti variabili:

1. Il numero di feature utilizzate, la loro posizione nello spettro e la loro identità. Le feature possono essere temperature di brillantezza o differenze tra temperature di brillantezza.
2. La presenza o meno di un errore sui dati di radianza.
3. La consistenza numerica del *training set* e del *test set* di ottimizzazione.
4. I valori minimi e massimi di C e γ per la cosiddetta fase di *cross validation*.
5. La somma minima e la differenza massima ammesse tra le accuratze.
6. La durezza della soglia che esclude alcuni spettri perché troppo vicini all'iperpiano ottimale.

Questo tipo di dati, avulsi dall'identità del caso studio, saranno detti *parametri estrinseci*. **I parametri estrinseci hanno un grande effetto sull'accuratezza del risultato**, e un utente che utilizzi ICICLE per la prima volta potrebbe rimanere spiazzato dagli scarsi risultati ottenuti utilizzando le impostazioni di default. I parametri estrinseci determinano anche la durata del run, **che nel peggiore dei casi potrebbe addirittura non concludersi** a causa degli overflow. Il tempo impiegato dalla routine *Ottimizzazione*, in particolare, è **molto sensibile al numero di combinazioni di feature possibili**. Se ad esempio fossero disponibili 30 canali e tramite la routine *Ottimizzazione* si desiderasse ottenere

```

Editor - ICICLE.m Command Window
Nuovo run di ICICLE.
Questa versione di ICICLE è compatibile con matlab 2016a gnlx64 e matlab 2017a gnlx64.
I file di questo run saranno salvati nella cartella ~/Scrivania/Tesi/Codici/ICICLE/ERROR_0_PERCENT/CHANNELS/NCH_22_NFEATMAX_22/STclear
In questo run saranno utilizzati 22 canali.
Questo run utilizza 1002 spettri.
Questo run effettua la classificazione tramite un numero di feature decrescente, da un massimo di 22 a un minimo di 18.
Questo run utilizza come feature le temperature di brillantezza relative ai canali di RFTS.
Questo run disegna i grafici delle accuratezze.
Questo run include un errore strumentale gaussiano la cui deviazione standard è pari allo 0% della radianza.
Questo run effettua una media mobile su 3 canali per ridurre gli errori.
Questo run effettua la classificazione anche tramite i soli canali nel medio infrarosso, per effettuare confronti.
Lettura dei dati di input completa (1/8).
Tempo impiegato per la conversione delle radianze in BT: 73.8915 secondi
Conversione in temperature di brillantezza effettuata (2/8).
Suddivisione dei file di radianza in classi eseguita (3/8).
Scrittura delle ultime matrici completata (4/8).
Ottimizzazione al 50%...
Ci sono voluti 0 minuti e 1 secondi per ottimizzare la scelta delle feature.
Operazione 1 di 6 per quanto riguarda le ottimizzazioni.
Cross validation al 10%...
Cross validation al 20%...
fx

```

Figura 5.1: Output su linea di comando prodotto da ICICLE in Matlab.

i 15 canali ottimali, **la routine dovrebbe effettuare un ciclo sulle $N_{comb} = \frac{30!}{15!15!} = 155117520$ combinazioni possibili**. Questo porterebbe alla creazione di una matrice enorme, che potrebbe rendere impossibile concludere il run. **Il codice ha quindi dei limiti intrinseci di cui si deve sempre tenere conto.**

I *parametri intrinseci* sono invece direttamente relazionati all'identità delle classi e degli spettri utilizzati. Tra di essi, abbiamo:

1. Il numero delle classi.
2. Le stringhe che identificano le classi.
3. Eventuali gruppi di spettri esclusi.
4. La varietà e il numero degli spettri.

Evidentemente, se i parametri intrinseci sono gli stessi, stiamo esaminando lo stesso caso studio. Infatti, modificando i parametri estrinseci, stiamo solo cercando di raffinare i risultati ottenibili tramite ICICLE. **Se modifichiamo i parametri intrinseci, invece, stiamo esaminando un diverso caso studio.** Per comprendere il concetto, supponiamo di voler identificare i cieli sereni e cieli nuvolosi in un determinato *test set*. Se scegliamo di utilizzare 10, 15 o 20 canali degli spettri disponibili, **il nostro caso studio non è mutato: stiamo semplicemente decidendo quanti dei dati disponibili utilizzare.** **Se invece decidiamo di escludere arbitrariamente alcuni spettri che reputiamo problematici il nostro caso studio è mutato, perché la *test set* è differente.**

Nella presente sezione saranno illustrati i risultati prodotti da ICICLE per 2 casi studio, e ne sarà studiata la sensibilità ai parametri estrinseci. Per un confronto più proficuo, sono stati utilizzati gli stessi canali di RFTS per tutti i casi studio. Tali canali sono riportati nelle figure 5.2 e 5.3.

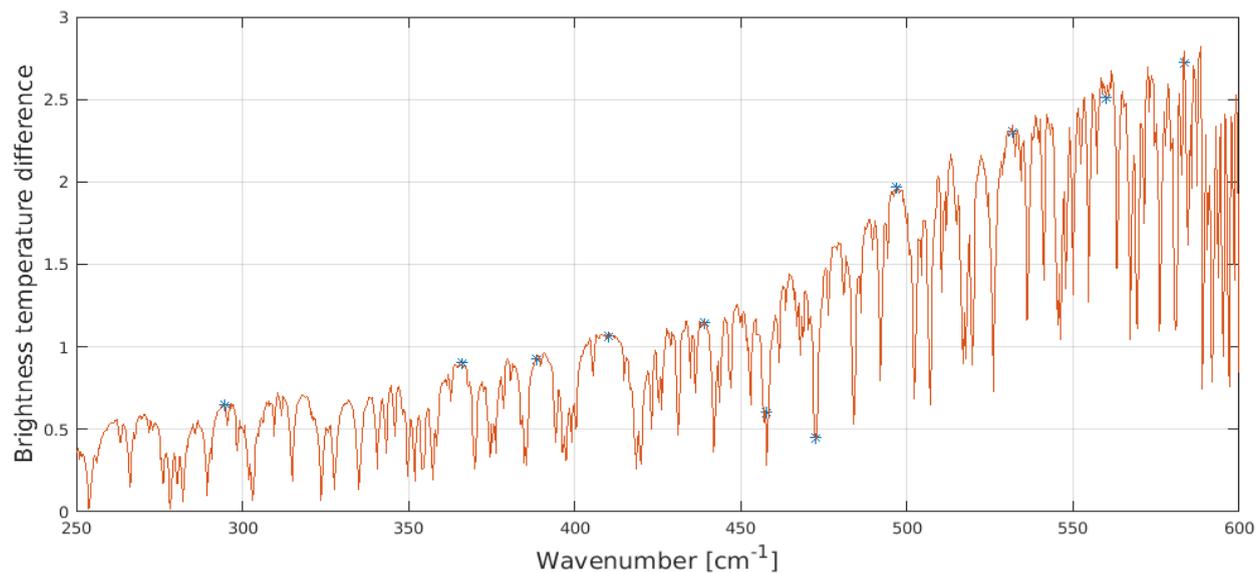


Figura 5.2: Canali di RFTS utilizzati dai run di ICICLE nei casi studio nel FIR. Lo spettro (in rosso) è la differenza tra una radianza simulata in cielo sereno e una radianza simulata in presenza di un cirro subvisibile. I canali sono segnalati con degli asterischi blu. I canali corrispondono ai numeri d'onda di 294.5 cm^{-1} , 366 cm^{-1} , 388.5 cm^{-1} , 410 cm^{-1} , 439 cm^{-1} , 457.5 cm^{-1} , 472.5 cm^{-1} , 497 cm^{-1} , 531.6 cm^{-1} , 560 cm^{-1} e 583.4 cm^{-1} .

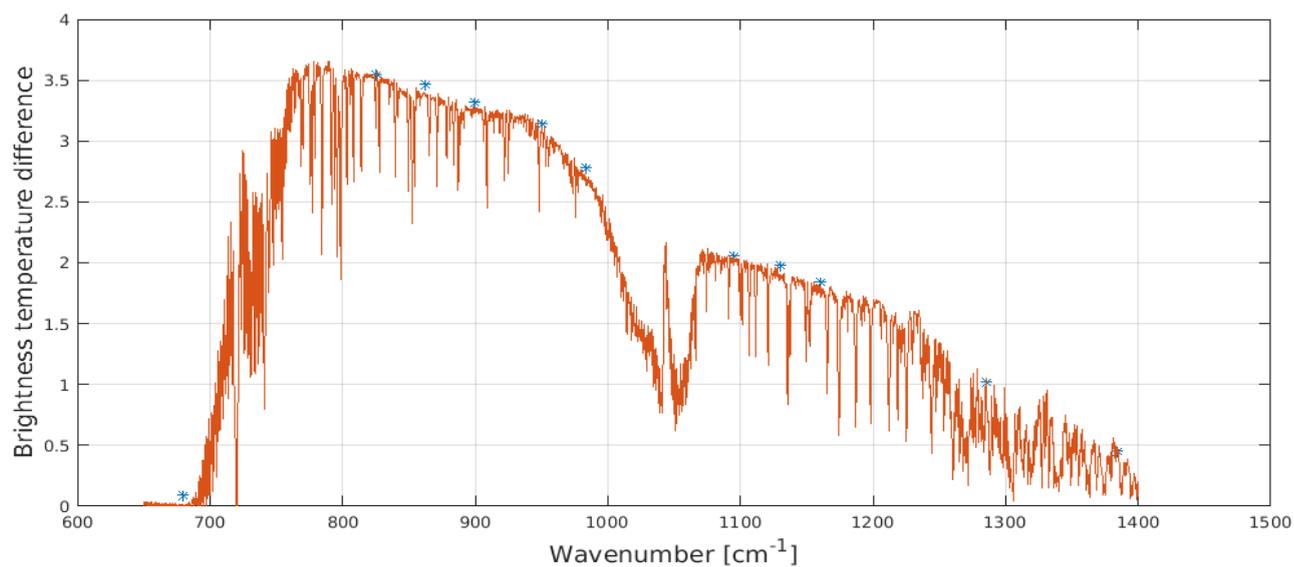


Figura 5.3: Canali di RFTS utilizzati dai run di ICICLE nei casi studio nel MIR. Lo spettro (in rosso) è la differenza tra una radianza simulata in cielo sereno e una radianza simulata in presenza di un cirro subvisibile. I canali sono segnalati con degli asterischi blu. I canali corrispondono ai numeri d'onda di 680 cm^{-1} , 825 cm^{-1} , 862 cm^{-1} , 900 cm^{-1} , 950 cm^{-1} , 984 cm^{-1} , 1095 cm^{-1} , 1130 cm^{-1} , 1160 cm^{-1} , 1285.2 cm^{-1} e 1384 cm^{-1} .

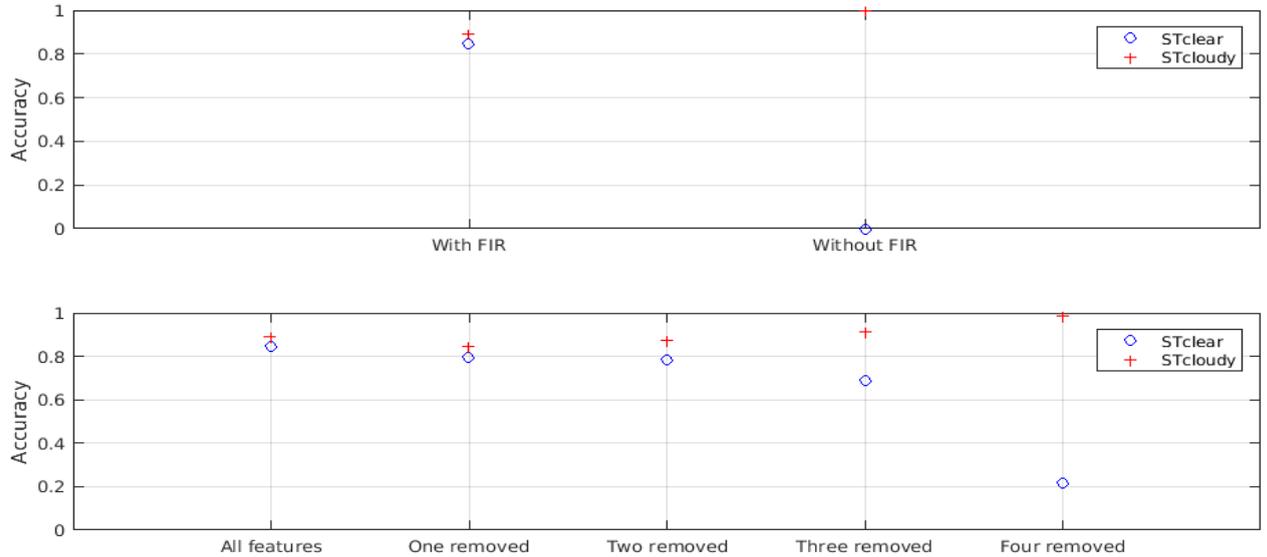


Figura 5.4: Accuratezze relative al run di controllo del primo caso studio. Per effettuare la classificazione sono stati utilizzati i 22 canali indicati nel paragrafo precedente. Come si può intuire dalla figura, nel pannello inferiore sono rappresentate le accuratezze ottenute rimuovendo via via un canale, partendo da un massimo di 22 e arrivando a un minimo di 18. I pallini blu indicano le accuratezze relative alla classe dei cieli sereni, mentre le croci rosse indicano le accuratezze relative alla classe dei cieli nuvolosi.

5.2 Primo caso studio per ICICLE: cloud mask

Dato che per esemplificare le performance di un programma è opportuno studiare i casi più semplici, **si è deciso di effettuare una classificazione a 2 classi: i cieli sereni e i cieli nuvolosi** (classi STclear e STcloudy). In questo caso studio si esaminerà **la sensibilità del codice alla variazione dei parametri estrinseci e l'identità degli spettri che vengono classificati con più difficoltà**. È stato utilizzato il dataset standard (89 spettri in cielo sereno e 969 in cielo nuvoloso).

Effettuare una cloud mask è possibile anche senza disporre del lontano infrarosso. MODIS, ad esempio, non dispone di canali nel lontano infrarosso, ma tra i prodotti dello strumento sono presenti anche delle cloud mask. Tuttavia, gli studi di sensibilità lasciano supporre che **tramite l'uso del lontano infrarosso l'accuratezza delle classificazioni possa incrementare**. Nel presente caso studio, **questo fatto è stato verificato: utilizzando i canali del lontano infrarosso le accuratezze relative sono aumentate in modo significativo**. Tuttavia, ciò è avvenuto **soltanto utilizzando il kernel lineare: utilizzando il kernel gaussiano non si sono osservate variazioni significative**. Probabilmente, infatti, **il kernel gaussiano è inadatto a questo tipo di classificazione**.

È importante sottolineare anche che, a volte, **il valore delle accuratezze relative può oscillare in modo irregolare cambiando il numero di feature a causa della struttura del codice**. **I valori di C e di γ ottimali dipendono infatti dal numero di feature utilizzate**, e non è detto che negli intervalli ΔC e $\Delta \gamma$ stabiliti all'interno del codice sia presente la coppia (C, γ) ottimale per una certa combinazione di feature, mentre potrebbe essere presente la coppia ottimale per un'altra combinazione di feature.

Detto ciò, per il presente caso studio sono stati effettuati 5 run. Tra questi run sono presenti 2 run di controllo e 3 run paralleli al run di controllo principale. Ciò che caratterizza un run di controllo è l'ordine degli spettri all'interno della matrice delle temperature di brillantezza $BT(\nu, spettro)$. Questo ordine ha un impatto sul training set e sul test set di ottimizzazione: il primo troncone della matrice BT è infatti preso da ICICLE come training set, il secondo troncone come test set di ottimizzazione e il terzo come test set vero e proprio. In run di controllo diversi, a parità di numero di elementi nel training set e nel test set di ottimizzazione, si avrà una variazione della loro composizione. Il modello generato e le accuratze risultanti saranno quindi differenti.

5.2.1 I canali ottimizzati

In figura 5.4 è riportato un esempio di plot prodotto da ICICLE. Si tratta del grafico che rappresenta l'andamento delle accuratze in funzione del numero di canali utilizzati. I canali utilizzati tra quelli disponibili sono stati selezionati dalla subroutine *Ottimizzazione* di ICICLE. I canali utilizzati sono stati gli stessi in tutti i run di questo caso studio e sono riportati nella tabella 5.1.

Caso studio 1			
Numero canali	Canale rimosso	Somma autovalori (1 can.)	Somma autovalori (5 can.)
22	-	5346	5322
21	680 cm^{-1}	5328	5309
20	457.5 cm^{-1}	5282	5230
19	472.5 cm^{-1}	5230	5149
18	294.5 cm^{-1}	5112	5035
17	1384 cm^{-1}	4962	4890
16	388.5 cm^{-1}	-	4744
15	366 cm^{-1}	4665	4596
14	410 cm^{-1}	4492	4421
13	439 cm^{-1}	4310	4244
12	1285.2 cm^{-1}	4069	4059
11	583.4 cm^{-1}	n.c.	3824
10	497 cm^{-1}	3541	3578
9	531.6 cm^{-1}	3261	3306
8	560 cm^{-1}	2972	3016
numeri d'onda relativi agli 8 canali con maggiore informazione			
825 cm^{-1} , 862 cm^{-1} , 900 cm^{-1} , 950 cm^{-1} , 984 cm^{-1} , 1095 cm^{-1} , 1130 cm^{-1} , 1160 cm^{-1}			

Tabella 5.1: Tabella che illustra l'identità dei canali selezionati dalla subroutine *Ottimizzazione* e il loro contenuto di informazione per il dataset standard (i 1058 spettri indicati nella Sezione 3.3). Per interpretare la seconda colonna della tabella, si tenga conto che rispetto alla riga superiore viene espunto il canale indicato. Ad esempio, per le classificazioni con 19 canali, sono stati rimosse le BT relative ai numeri d'onda 472.5 cm^{-1} , 457.5 cm^{-1} e 680 cm^{-1} . Nella terza colonna è indicata la somma degli autovalori della matrice di covarianza delle BT relative ai canali utilizzati. Tale parametro dà un'idea del contenuto di informazione del dataset (per approfondimenti, si consulti l'Appendice tecnica B). Nella quarta colonna, è riportato lo stesso parametro nel caso in cui le BT siano calcolate effettuando la media delle radianze sui 5 canali attorno al numero d'onda centrale. L'errore sulle radianze è in tutti i casi dell'1%. La dicitura *n.c.* sta per *non calcolato*.

Osservando la tabella, si evince come nel dataset standard (1058 spettri) **i canali del lontano infrarosso contengano una buona quantità di informazione**, ma non quanta quella presente nel MIR. Infatti, **gli 8 canali che contengono più informazione sono tutti nel MIR**. È importante rilevare come la quantità di informazione aggiuntiva presente nel FIR potrebbe essere utile solo per certi tipi di classificazione e non per altri.

È possibile anche osservare che **i canali che contengono meno informazione sono quello posto nella banda della CO₂ e i canali opachi nella banda rotazionale del vapore acqueo**, nonché quelli più periferici nello spettro di emissione terrestre, sia nel FIR che nel MIR.

5.2.2 Il run di controllo

Per questo caso studio è stato effettuato **uno studio di sensibilità del codice alla variazione dei parametri estrinseci**. In pratica, si è cercato di osservare come variano le *accuratezze relative* al variare di tali parametri.

Prima di tutto è stato lanciato il run di controllo. I parametri estrinseci più rilevanti del run di controllo sono riportati nella tabella 5.2:

Run di controllo (caso studio 1)	
Parametro	Valore
1: Numero canali massimo e minimo	22 e 17 (standard)
2: Numero canali nel MIR	11 (standard)
3: Errore sulla radianza	1%
4: Numero di canali per la media	5
5: Spettri nel training set	9 (STclear), 96 (STcloudy)
6: Spettri nel test set di ott.	18 (STclear), 144 (STcloudy)
7: Criterio di massimizzazione	Somma delle accuratezze relative
8: Classe privilegiata	Cieli sereni
9: Somma minima tra accuratezze relative	1.75
10: Differenza massima tra accuratezze relative	0.4
11: Tipo di kernel	lineare
12: Parametro di tolleranza per casi non classificati	30

Tabella 5.2: Tabella che illustra i parametri estrinseci utilizzati per il primo run di controllo.

Prima di tutto, spieghiamo nel dettaglio il significato di tutti i parametri. I primi 2 sono già stati trattati. Il parametro 3 è l'errore percentuale inserito sui dati di radianza, prima della conversione in BT. **Un errore dell'1% nelle radianze è superiore all'errore di FORUM nel FIR**, ed è stato scelto per questo motivo. Il parametro 4 è il numero di canali attorno al numero d'onda centrale scelto per ciascun canale utilizzati per effettuare una media e ridurre l'errore.

I parametri 6 e 7 sono il numero di spettri di ciascuna classe utilizzati per il training set e per il test set di ottimizzazione. **Il modello per la classificazione viene creato in base al training set e dal test set di ottimizzazione**, per cui si tratta di due parametri fondamentali. Il settimo parametro è il criterio di massimizzazione delle accuratezze relative scelto per il run. **In questo run, è stata massimizzata la somma delle accuratezze relative**, cercando di far sì che fossero i cieli sereni ad avere l'accuratezza relativa più alta (parametro 8).

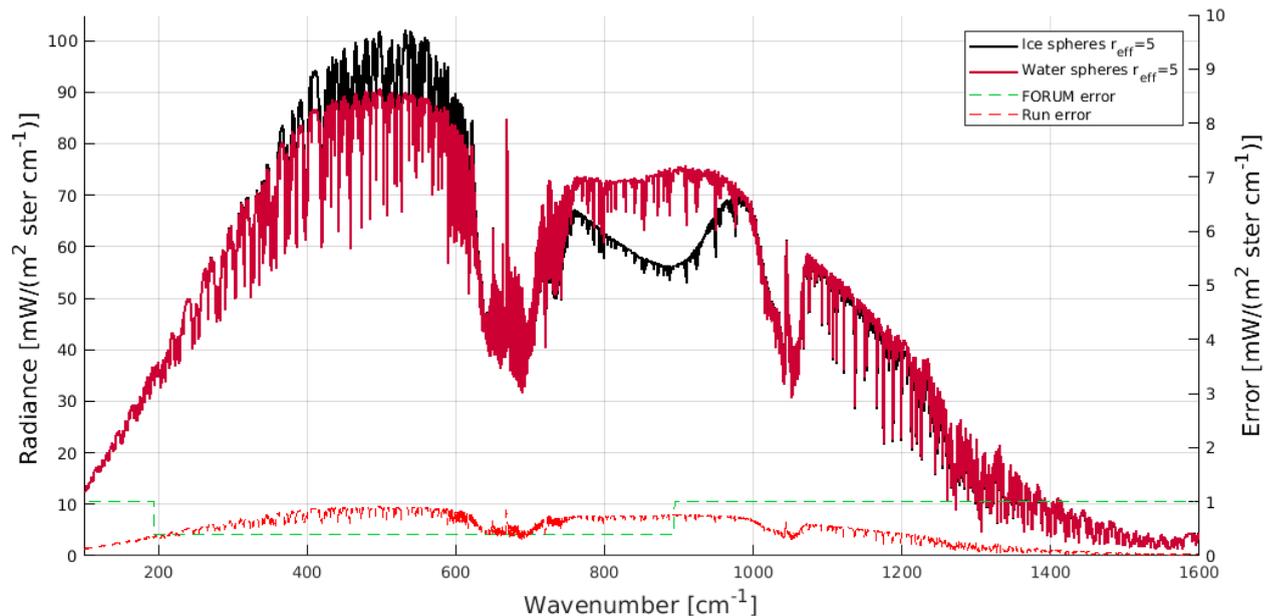


Figura 5.5: Due spettri tipici nel dataset standard (riferiti all’asse y a sinistra) ed errori assoluti sulla radianza di FORUM e del run (riferiti all’asse y di destra). Si noti come per la parte centrale dello spettro l’errore del run sia superiore a quello di FORUM. Gli spettri sono presi dal quarto caso studio.

I parametri 9 e 10 sono le soglie che le accuratèzze relative dovevano rispettare per essere ammesse nella fase di cross validation: **una somma delle accuratèzze di 1.75 è piuttosto elevata**, dato che almeno una delle accuratèzze relative deve superare l’87,5% perché la soglia sia superata. Il tipo di kernel utilizzato è stato lineare (parametro 11): **con il kernel lineare i tempi di calcolo sono più brevi, la classificazione risulta migliore per la cloud mask e nella cross validation le accuratèzze relative vengono testate al variare di un solo parametro, il costo C** . Il parametro 12, infine, è un valore numerico che indica quanto è severo il nostro criterio per escludere uno spettro dalla classificazione perché troppo vicino all’iperpiano ottimale. **Un valore pari a 30 indica un criterio molto indulgente**, mentre valori inferiori a 1 indicano un criterio molto severo.

Ciò che salta subito all’occhio osservando la figura 5.4 è che l’ottavo parametro sembra non aver avuto effetto sulla classificazione. Infatti, **i cieli nuvolosi sono stati regolarmente classificati meglio dei cieli sereni**. Questo può capitare. **Nonostante le accuratèzze relative ai cieli sereni siano maggiori di quelle relative ai cieli nuvolosi quando il modello viene applicato al test set di ottimizzazione, questo fatto potrebbe non risultare vero quando il modello viene applicato al test set vero e proprio**. Inoltre, consultando l’output del run, **si nota come il criterio automatico per la selezione del parametro C non sia stato rispettato per nessuno ciclo, eccetto il primo (in cui sono stati utilizzati 22 canali). Il codice ha quindi ignorato i parametri 8, 9 e 10 e ha semplicemente massimizzato la somma delle accuratèzze relative, che è l’opzione alternativa utilizzata in questo caso**.

Una domanda che può sorgere spontanea è **quale sia l’identità dei casi non classificati o classificati erroneamente**. Nel nostro caso, data l’indulgenza del criterio per la determinazione dei casi da non classificare, **solo una minima frazione degli spettri è stata esclusa dalla classificazione**.

Nella tabella 5.3 se ne dà una lista esaustiva per il primo ciclo (22 canali):

Run di controllo (caso studio 1)		
Spettro non classificato	Atmosfera	Classe
STsolc0r30v01 OD 0.30 B 13000 T 14000	IG2 TRO NO WI NI	STcloudy
STsolc0r50v01 OD 2.00 B 13000 T 14000	IG2 TRO NO WI NI	STcloudy
STsolc0r30v01 OD 0.50 B 14000 T 15000	JAN 00LA10LO340 LBLGAS	STcloudy

Tabella 5.3: Tabella che illustra i casi non classificati per il primo ciclo del primo run di controllo. Nella prima colonna sono indicate le proprietà della nube.

Due degli spettri dei casi non classificati sono stati registrati in presenza di una nube di basso spessore ottico, ma non bassissimo. In generale, infatti, un caso risulta non classificato quando è molto prossimo all'iperpiano ottimale, anche se si trova sul lato corretto. Per questo motivo **uno spettro escluso dalla classificazione potrebbe appartenere in modo deciso alla classe a cui era stato correttamente assegnato**. L'idea dietro all'introduzione degli spettri non classificati è quella di **ridurre il numero di casi classificati erroneamente, anche a spese di una diminuzione dei casi classificati correttamente**.

Per quanto riguarda gli spettri classificati erroneamente, ve ne sono in gran numero in entrambe le classi. Nella tabella 5.4 ne è riportata una lista non esaustiva:

Run di controllo (Caso studio 1)		
Spettro classificato erroneamente	Atmosfera	Classe
290 K	IG2 TRO NO SU DA	STclear
290 K	JUL 12LA10LO300	STclear
296 K	IG2 TRO NO SU DA	STclear
285 K	IG2 TRO NO SU DA	STclear
285.5 K	JAN 12LA10LO340	STclear
STcl8e0r10v01 OD 0.01 B 13000 T 14000	OCT 12LA10LO340	STcloudy
STplat0r10v01 OD 0.01 B 13000 T 14000	APR 00LA10LO340 LBLGAS	STcloudy
STplat0r06v01 OD 0.03 B 12000 T 13000	IG2 MID NO SU DA	STcloudy
STplat0r20v01 OD 0.02 B 7000 T 8000	IG2 TRO NO WI NI	STcloudy
STsolc0r04v01 OD 0.01 B 15000 T 16000	IG2 MID NO SU DA	STcloudy

Tabella 5.4: Tabella che illustra i casi classificati erroneamente per il primo ciclo del primo run di controllo. Nel caso in cui la classe sia STclear, nella prima colonna è indicata la temperatura superficiale.

Si evince facilmente dalla tabella che **gli spettri classificati erroneamente presentano delle caratteristiche ricorrenti**. Ad esempio, gli spettri in cielo sereno classificati come nuvolosi **sono caratterizzati da una temperatura superficiale generalmente bassa**. Molti spettri classificati erroneamente sono relativi ad atmosfere estive: **infatti, nel training set e nel test set di ottimizzazione non sono presenti spettri relativi all'estate** per quanto riguarda la classe STclear.

Per quanto riguarda gli spettri relativi a cieli nuvolosi, essi sono classificati come sereni quando **sono caratterizzati da nubi di spessore ottico molto basso**. Nonostante la forma dei cristalli di ghiaccio sembri ricorrente, non è la causa dell'errata classificazione. Infatti, **i cirri sottili simulati sono in gran parte composti di piatti esagonali o colonne solide**, forme ricorrenti in questo tipo di nube. Lo stesso discorso vale per la quota: i cirri sottili sono stati posti in generale a quote elevate.

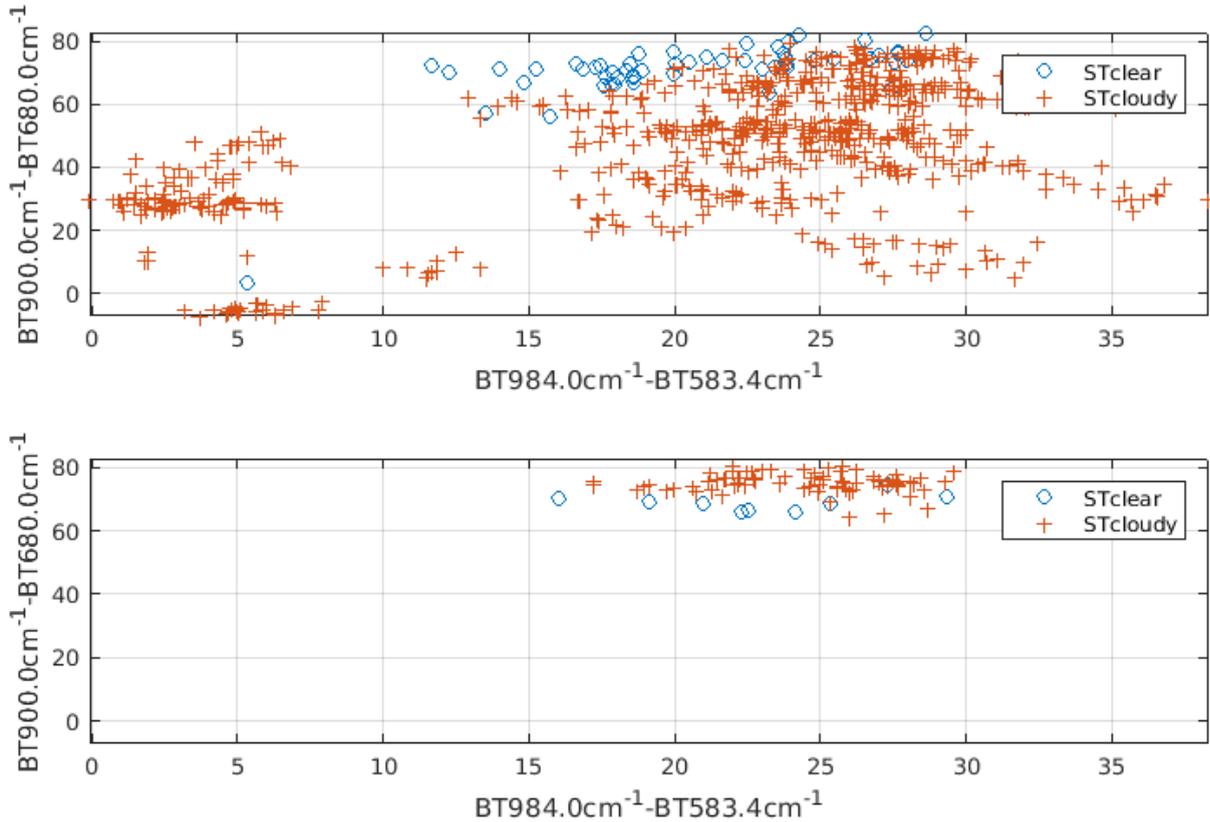


Figura 5.6: Scatter plot relativo al primo ciclo del run di controllo del primo caso studio (22 canali). Nel pannello superiore sono rappresentati i casi classificati correttamente. Nel pannello inferiore sono rappresentati i casi classificati erroneamente. In ascissa si ha la differenza in BT tra un canale nel MIR e uno del FIR, mentre in ordinata si ha la differenza in BT tra un canale del MIR e il centro della banda della CO_2 . Nel pannello superiore, in basso a sinistra, si può notare uno spettro problematico relativo a un caso in cielo sereno non rimosso dal dataset.

Per intuire la distribuzione degli spettri classificati erroneamente si può ricorrere agli scatter plot. In figura 5.6 è rappresentato uno degli scatter plot prodotti automaticamente da ICICLE. Da esso si può evincere come **gli spettri relativi a cieli sereni classificati erroneamente siano caratterizzati da una differenza in BT in ordinata $\Delta BT_y = BT(900\text{ cm}^{-1}) - BT(680\text{ cm}^{-1})$ molto bassa**. Al contrario, tale parametro è generalmente piuttosto alto per gli spettri relativi a cieli nuvolosi classificati erroneamente (in questi casi, la nube è solitamente un cirro sottile).

In generale, si può osservare come i risultati del run di controllo rispettino tutte le nostre attese. **Aggiungendo i canali del FIR si ottengono classificazioni più accurate, i casi più difficili a classificarsi presentano delle caratteristiche ricorrenti** e possono essere facilmente individuati in uno scatter plot.

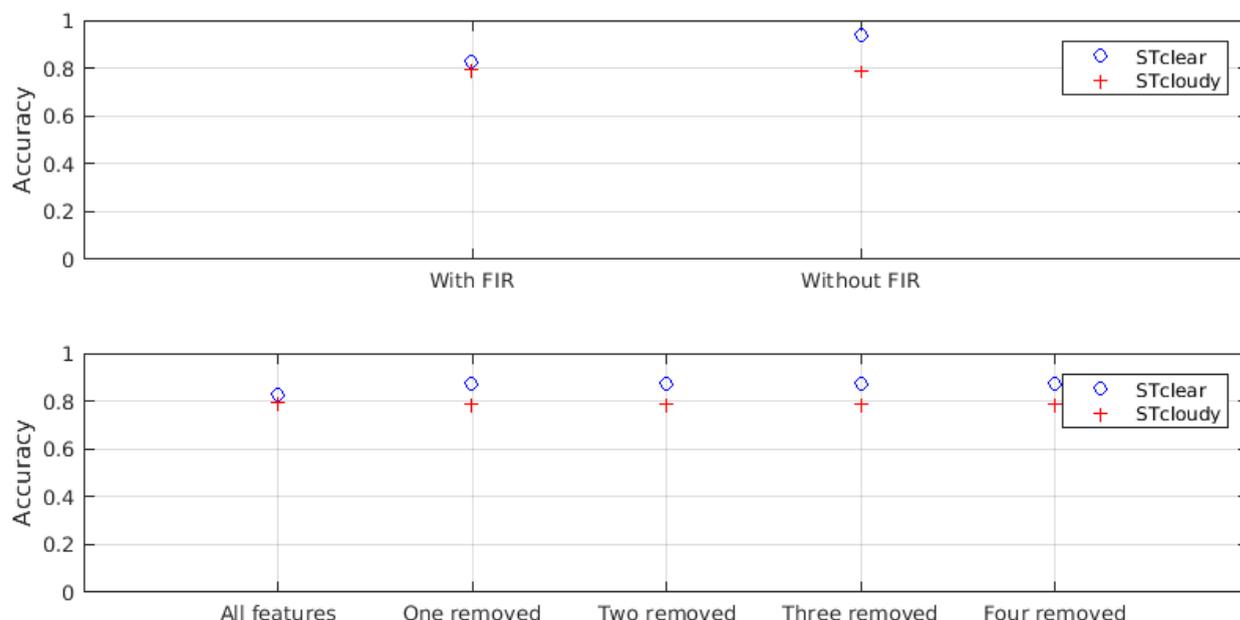


Figura 5.7: Plot delle accuratze relativo al primo run parallelo del primo caso studio.

5.2.3 Studio di sensibilità del codice

In seguito al lancio del run di controllo, sono stati effettuati altri 4 run in cui **l'ordine degli spettri nella matrice BT non è stato modificato**. Essi sono detti *run paralleli*.

Primo run parallelo: modifica del test set di ottimizzazione

Il primo run parallelo è stato lanciato con i parametri indicati nella tabella 5.5.

Rispetto al run di controllo, l'unico parametro modificato è **il numero di spettri nuvolosi nel test set di ottimizzazione**, che adesso è maggiore. Ci si aspetta quindi una classificazione migliore.

Nella figura 5.7 sono riportate le accuratze relative al primo run parallelo. Si può osservare come **tali accuratze siano migliori rispetto al run di controllo quale che sia il numero di canali utilizzato**, e che **il criterio per cui la classe dei cieli sereni deve avere un'accuratezza maggiore è sempre soddisfatto**. Anche utilizzando il solo MIR le accuratze risultano in questo caso molto alte. Evidentemente, **il training set e il test set di ottimizzazione sono molto buoni** e permettono una classificazione accurata anche senza i dati del FIR.

A titolo di esempio, nella tabella 5.6 sono riportati gli spettri in cielo sereno del training set (gli stessi del run di controllo). È importante che nel training set e nel test set di ottimizzazione siano presenti spettri molto variegati perché la classificazione risulti buona.

Run parallelo 1 (caso studio 1)	
Parametro	Valore
1: Numero canali massimo e minimo	22 e 17 (standard)
2: Numero canali nel MIR	11 (standard)
3: Errore sulla radianza	1%
4: Numero di canali per la media	5
5: Spettri nel training set	9 (STclear), 96 (STcloudy)
6: Spettri nel test set di ott.	18 (STclear), 192 (STcloudy)
7: Criterio di massimizzazione	Somma delle accurattezze relative
8: Classe privilegiata	Cieli sereni
9: Somma minima tra accurattezze relative	1.75
10: Differenza massima tra accurattezze relative	0.4
11: Tipo di kernel	lineare
12: Parametro di tolleranza per casi non classificati	30

Tabella 5.5: Tabella che illustra i parametri estrinseci utilizzati per il primo run parallelo del primo caso studio. I parametri modificati rispetto al run di controllo sono evidenziati in neretto.

Run parallelo 1 (caso studio 1)	
Temperatura superficiale	Atmosfera
301	OCT 12LA10LO340
285	OCT 12LA10LO340
285.5	OCT 12LA10LO340
290	OCT 12LA10LO340
296	OCT 12LA10LO340
291.5	OCT 12LA10LO340
300.5	OCT 12LA10LO340
300.93	IG2 TRO NO WI NI wv1.1
285	IG2 TRO NO WI NI wv1.1

Tabella 5.6: Spettri in cielo sereno del training set del primo run parallelo del primo caso studio. Nonostante ICICLE abbia selezionato spettri con temperature superficiali molto variegata, ha attinto quasi in tutti i casi dalla medesima atmosfera. Questo fatto può causare un *bias*.

Secondo run parallelo: modifica del numero di canali su cui effettuare la media

Passiamo ora al secondo run parallelo, i cui dati sono illustrati nella tabella 5.7.

In tale run, l'unico parametro modificato è il numero di canali attorno al numero d'onda centrale su cui effettuare la media. **In questo run non è stata effettuata alcuna media**, e i risultati sono migliorati. Ciò è probabilmente dovuto al calo del contenuto informativo intrinseco dei canali mediati (si studi la tabella 5.2 in proposito). Da questo fatto si deduce che **effettuare la media ha un notevole costo sul contenuto informativo e sulle accurattezze**, e **non è un buon rimedio alla presenza di un errore strumentale**, almeno se si sono utilizzati dei canali molto rumorosi. Infatti, osservando bene la tabella 5.2, si nota che **utilizzando pochi canali caratterizzati da elevato rapporto segnale rumore (SNR) il contenuto informativo aumenta effettuando la media mobile**.

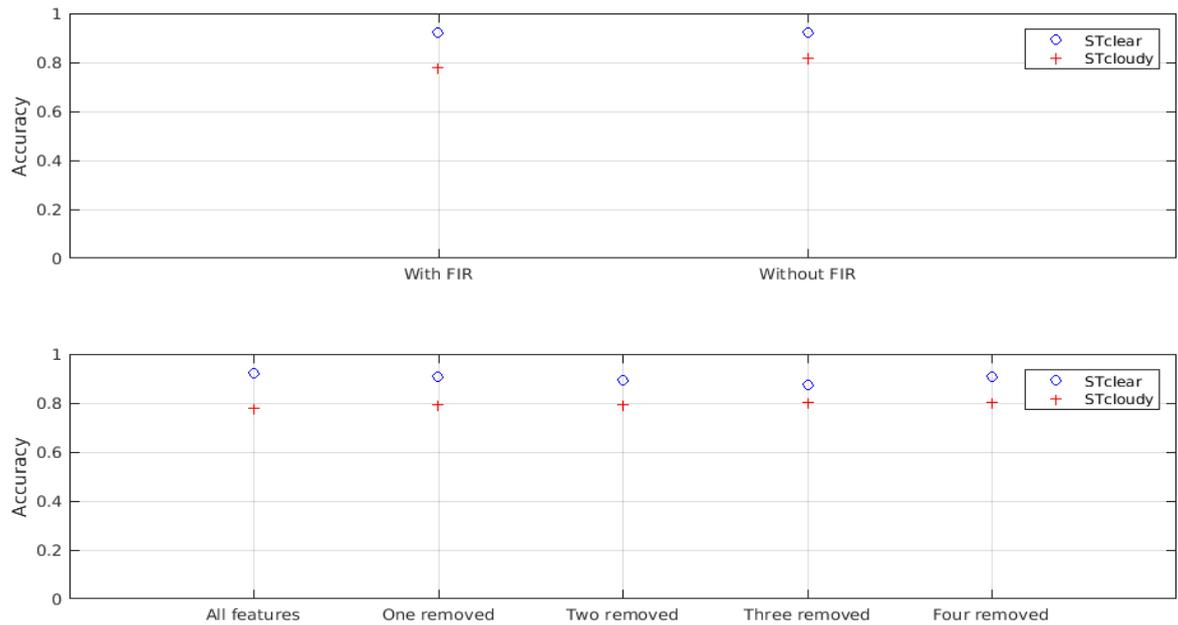


Figura 5.8: Plot delle accuratze relativo al secondo run parallelo del primo caso studio.

Run parallelo 2 (caso studio 1)	
Parametro	Valore
1: Numero canali massimo e minimo	22 e 17 (standard)
2: Numero canali nel MIR	11 (standard)
3: Errore sulla radianza	1%
4: Numero di canali per la media	1
5: Spettri nel training set	9 (STclear), 96 (STcloudy)
6: Spettri nel test set di ott.	18 (STcloudy), 144 (STcloudy)
7: Criterio di massimizzazione	Somma delle accuratze relative
8: Classe privilegiata	Cieli sereni
9: Somma minima tra accuratze relative	1.75
10: Differenza massima tra accuratze relative	0.4
11: Tipo di kernel	lineare
12: Parametro di tolleranza per casi non classificati	30

Tabella 5.7: Tabella che illustra i parametri estrinseci utilizzati per il secondo run parallelo del primo caso studio. I parametri modificati rispetto al run di controllo sono evidenziati in neretto.

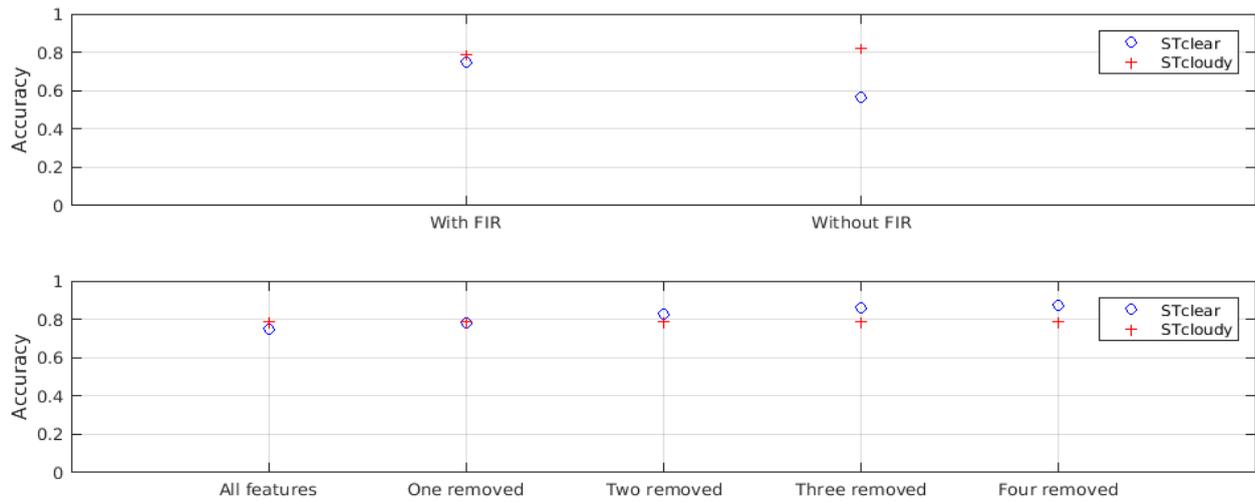


Figura 5.9: Plot delle accuratze relativo al terzo run parallelo del primo caso studio.

Terzo run parallelo: casi non classificati

L'obiettivo del terzo run parallelo è stato osservare la reazione del codice a un parametro più restrittivo nella determinazione dei casi non classificati. **Dato che ci si aspettava una diminuzione delle accuratze, sono stati modificati altri parametri per rendere più agevole il compito del codice**, come la frazione di spettri nel test set di ottimizzazione (posta uguale a quella del run 1, visti i buoni risultati) e la soglia 9.

Run parallelo 3 (caso studio 1)	
Parametro	Valore
1: Numero canali massimo e minimo	22 e 17 (standard)
2: Numero canali nel MIR	11 (standard)
3: Errore sulla radianza	1%
4: Numero di canali per la media	5
5: Spettri nel training set	9 (STclear), 96 (STcloudy)
6: Spettri nel test set di ott.	18 (STclear), 192 (STcloudy)
7: Criterio di massimizzazione	Somma delle accuratze relative
8: Classe privilegiata	Cieli sereni
9: Somma minima tra accuratze relative	1.3
10: Differenza massima tra accuratze relative	0.4
11: Tipo di kernel	lineare
12: Parametro di tolleranza per casi non classificati	1

Tabella 5.8: Tabella che illustra i parametri estrinseci utilizzati per il terzo run parallelo del primo caso studio. I parametri modificati rispetto al run di controllo sono evidenziati in neretto.

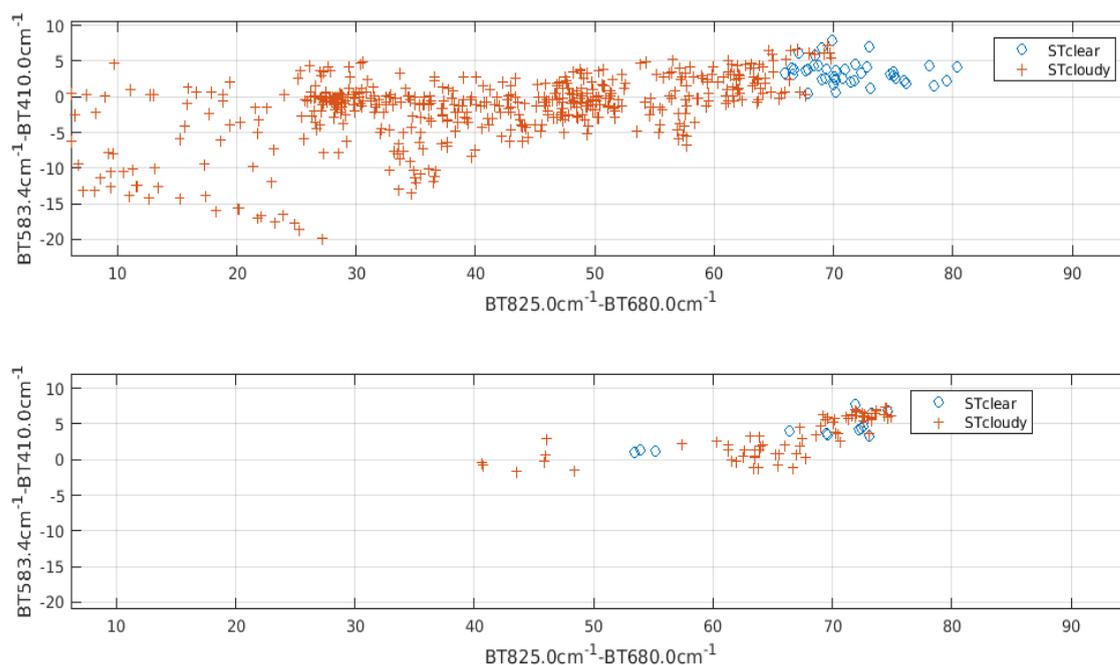


Figura 5.10: Scatter plot relativo al terzo run parallelo del primo caso studio. Nel pannello superiore sono rappresentati i casi classificati correttamente, mentre nel pannello inferiore sono rappresentati i casi esclusi dalla classificazione.

A causa della diminuzione della tolleranza nella selezione degli spettri non classificati (tabella 5.8), **il numero di tali spettri è aumentato notevolmente in questo run**. Nella tabella 5.9 si può apprezzare **il numero di casi classificati correttamente e non classificati** per ogni classe e per ogni ciclo del run.

Run parallelo 3 (caso studio 1)		
Ciclo	Spettri ben classificati	Spettri non classificati
1, 22 canali	75% (STclear), 79% (STcloudy)	9% (STclear), 6.5% (STcloudy)
2, 21 canali	78.1% (STclear), 79% (STcloudy)	6.5% (STclear), 6% (STcloudy)
3, 20 canali	82.8% (STclear), 79% (STcloudy)	3.3% (STclear), 5.3% (STcloudy)
4, 19 canali	85.9% (STclear), 79% (STcloudy)	1% (STclear), 5% (STcloudy)
5, 18 canali	87.5% (STclear), 79.8% (STcloudy)	0% (STclear), 5.5% (STcloudy)
6, 11 canali (solo MIR)	56.2% (STclear), 79% (STcloudy)	19% (STclear), 8% (STcloudy)

Tabella 5.9: Tabella che illustra la frazione sul totale degli spettri ben classificati e non classificati sul totale per ogni ciclo del terzo run parallelo del primo caso studio.

La tabella illustra bene come **il numero di casi non classificati è massimo utilizzando il solo MIR oppure tutti i 22 canali disponibili**. Si tenga sempre conto che tra i 22 canali ne sono presenti alcuni **la cui variabilità è data prevalentemente dal rumore strumentale**, e possono agire negativamente sull'accuratezza del modello creato per effettuare la classificazione. Da questo fatto si deduce che è **opportuno utilizzare feature la cui varianza è determinata solo in minima**

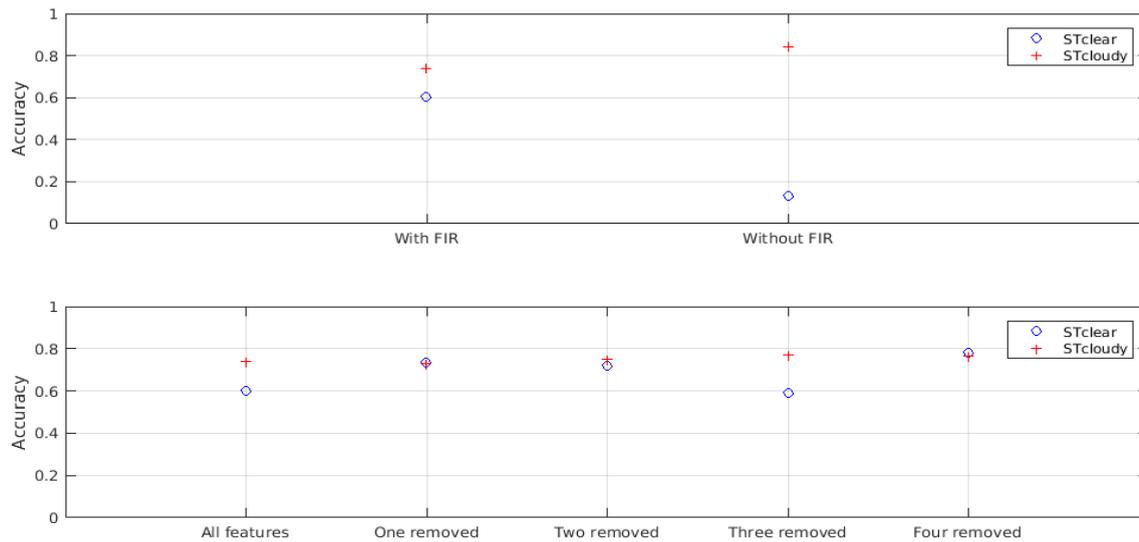


Figura 5.11: Plot delle accuratze relativo al quarto run parallelo del primo caso studio.

parte dal rumore strumentale quando si utilizza ICICLE.

Quarto run parallelo: un criterio diverso per la selezione delle accuratze

Come è stato evidenziato nelle sezioni precedenti, **non necessariamente la somma delle accuratze è un buon parametro per la bontà della nostra classificazione**. Se ad esempio desiderassimo individuare con certezza un gruppo di spettri relativi ai cieli nuvolosi, dovremmo essere sicuri con un buon margine di confidenza che **tutti gli spettri relativi a cieli sereni siano stati classificati come tali**. Infatti, se l'accuratezza relativa alla classe STclear fosse del 100%, **uno spettro classificato come appartenente alla classe STcloudy non potrebbe mai appartenere alla classe STclear**.

Il quarto run parallelo ha avuto lo scopo di osservare la performance del codice in una casistica di questo tipo. **Il parametro da massimizzare nella fase di cross validation è stato infatti l'accuratezza relativa ai cieli sereni**. Come si può evincere dalla figura 5.11, **l'accuratezza relativa alla classe STclear senza l'utilizzo del FIR è molto bassa**. Questo fatto è dovuto alla **riduzione del training set**, dimezzato per entrambe le classi rispetto ai casi precedenti.

Run parallelo 4 (caso studio 1)	
Parametro	Valore
1: Numero canali massimo e minimo	22 e 17 (standard)
2: Numero canali nel nel MIR	11 (standard)
3: Errore sulla radianza	1%
4: Numero di canali per la media	5
5: Spettri nel training set	5 (STclear), 48 (STcloudy)
6: Spettri nel test set di ott.	18 (STclear), 192 (STcloudy)
7: Criterio di massimizzazione	Accuratezza relativa ai cieli sereni
8: Accuratezza minima per la classe STcloudy	0.5
9: Tipo di kernel	lineare
9: Parametro di tolleranza per casi non classificati	1

Tabella 5.10: Tabella che illustra i parametri estrinseci utilizzati per il quarto run parallelo del primo caso studio. I parametri modificati rispetto al run di controllo sono evidenziati in neretto.

I risultati in figura 5.11 non sono quelli che si auspicavano. Una persona che non conosce il codice **potrebbe pensare che qualcosa sia andato storto**: infatti, in quasi tutti i casi le accuratezze relative alla classe STcloudy sono maggiori rispetto a quelle relative alla classe STclear, quando si era chiesto l'opposto. In realtà, **il codice ha avuto una buona performance nonostante nel training set fossero presenti solo 5 spettri della classe STclear**. Il fatto che i cieli nuvolosi siano stati classificati meglio è **attribuibile al grande numero di elementi della classe STcloudy presenti nel training set**, pari a 48, e al fatto che al codice **sia stato richiesto che le accuratezze relative alla classe STcloudy fossero uguali o superiori a 0.5**. Per questi motivi, questi risultati apparentemente paradossali sono quelli che ci si dovrebbe aspettare.

Dal quarto run parallelo si evince facilmente che **è molto importante che il training set sia grande e rappresentativo** per ottenere i risultati desiderati. Nella tabella 5.11 si trova anche un'importante conferma di quanto affermato rispetto al terzo run parallelo: **la presenza di feature rumorose aumenta il numero di casi non classificati**, o comunque vicini all'iperpiano ottimale.

Run parallelo 4 (caso studio 1)		
Ciclo	Spettri ben classificati	Spettri non classificati
1, 22 canali	60.3% (STclear), 79% (STcloudy)	18.6% (STclear), 12.5% (STcloudy)
2, 21 canali	73.5% (STclear), 73.2% (STcloudy)	14.3% (STclear), 11.2% (STcloudy)
3, 20 canali	72.1% (STclear), 75% (STcloudy)	15.4% (STclear), 11.7% (STcloudy)
4, 19 canali	58.8% (STclear), 77% (STcloudy)	25.3% (STclear), 11.9% (STcloudy)
5, 18 canali	77.9% (STclear), 76.8% (STcloudy)	8.8% (STclear), 8.3% (STcloudy)
6, 17 canali	79.4% (STclear), 75.7% (STcloudy)	7.7% (STclear), 8.3% (STcloudy)
7, 11 canali (solo MIR)	13.2% (STclear), 84.3% (STcloudy)	44% (STclear), 11.1% (STcloudy)

Tabella 5.11: Tabella che illustra la frazione sul totale degli spettri ben classificati e non classificati sul totale per ogni ciclo del quarto run parallelo.

5.3 Secondo caso studio: classificazione secondo la fase

Si è deciso di introdurre nel presente lavoro anche un secondo caso studio, il cui obiettivo è stata la **classificazione delle nubi secondo la fase**. In particolare, si è effettuata **una classificazione a 3 classi: cieli sereni, nubi composte in parte da acqua e nubi di ghiaccio**. Questo tipo di classificazione è **importante soprattutto alle alte latitudini** data la maggiore presenza di nubi d'acqua o in fase mista [18].

In questo caso studio è **stato considerato un dataset ridotto**. Infatti, sono stati esclusi tutti gli spettri **relativi a nubi la cui basse fosse oltre i 9 km di quota**. Ciò è stato fatto per **evitare di introdurre un bias**: infatti, le nubi poste a quote elevate sono tutte composte esclusivamente da cristalli di ghiaccio. **Utilizzando l'intero dataset, si rischiava di classificare gli spettri in base alla quota della nube, e non alla fase**.

Si rileva come **questo caso studio è solo illustrativo di una classificazione a 3 classi**: il dataset creato per il presente lavoro è ancora lacunoso per quanto riguarda le nubi d'acqua. Per questo, **i risultati del codice non rispettano del tutto le attese**.

5.3.1 I canali ottimizzati

Nel presente caso studio, le 3 classi da distinguere saranno indicate come STclear, SYctd e STcloudy. Nel dataset utilizzato, **91 spettri appartenevano alla classe STclear, 43 alla classe SYctd e 129 alla classe STcloudy**, per un totale di 263 spettri. Dato che il dataset è mutato rispetto al caso studio precedente, **i canali selezionati dalla routine Ottimizzazione sono stati differenti**, così come il loro contenuto informativo. Tali dati sono illustrati nella tabella 5.12.

Caso studio 2			
Numero canali	Canale rimosso	Somma autovalori (1° caso studio)	Somma autovalori (2° caso studio)
19	-	5230	4605
18	680 cm ⁻¹	5112	4548
17	388.5 cm ⁻¹	4962	4488
16	366 cm ⁻¹	n.c.	4414
15	1384 cm ⁻¹	4665	4328
14	410 cm ⁻¹	4492	4222

Tabella 5.12: Tabella che illustra l'identità dei canali rimossi dai 19 standard dalla subroutine *Ottimizzazione* e il contenuto informativo per il dataset utilizzato (i 263 spettri di cui si è parlato poco sopra). I 19 canali standard, **per questo caso studio**, sono i 22 standard meno quelli relativi ai numeri d'onda 294.5 cm⁻¹, 457.5 cm⁻¹ e 472.5 cm⁻¹. Nella terza e nella quarta colonna si confronta il contenuto informativo dell'intero dataset al contenuto informativo del dataset del 2° caso studio. In entrambi i casi, **la media mobile non è stata effettuata e l'errore sulle radianze è dell'1%**.

Dalla tabella 5.12 si evince che **i dati, in questo caso studio, sono più rumorosi**. Infatti, rimuovendo i canali con meno contenuto informativo **il calo dell'informazione è molto contenuto rispetto a quello che si osservava nel dataset completo**. Come è avvenuto nel caso precedente, quindi, **ci si deve aspettare che effettuando classificazioni utilizzando anche i canali rumorosi le accuratze possano essere più basse**.

Questo fatto era prevedibile. Infatti, **il segnale dato dalle nubi basse nel lontano infrarosso è molto più contenuto** a causa dell'opacità della banda rotazionale del vapore acqueo alle basse quote.

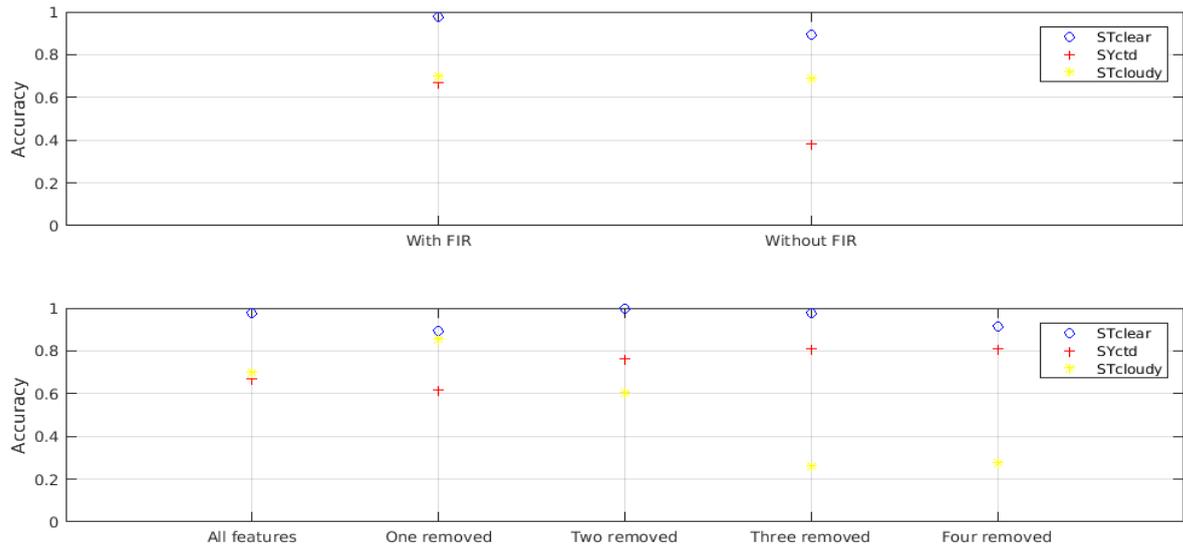


Figura 5.12: Plot delle accuratze relativo al run di controllo del secondo caso studio.

I canali rimossi indicati nella tabella 5.12, infatti, sono quasi tutti nel FIR.

Per questo caso studio sono stati lanciati **un run di controllo e 10 run paralleli**. Di tali run paralleli, solo 3 sono riportati nella tesi (quelli che hanno dato i risultati migliori). In questo caso studio, infatti, **ICICLE ha incontrato notevoli difficoltà** e i risultati della classificazione sono stati sensibili ai parametri estrinseci in modo poco prevedibile.

5.3.2 Run di controllo

Dato che la classificazione del presente caso studio è a 3 classi, **l'insieme di parametri utilizzati è diverso rispetto al caso studio precedente**. Tali parametri sono illustrati nella tabella 5.13.

Run di controllo (caso studio 2)	
Parametro	Valore
1: Numero canali massimo e minimo	19 e 14 (standard)
2: Numero canali nel MIR	11 (standard)
3: Errore sulla radianza	1%
4: Numero di canali per la media	1
5: Spettri nel training set	18 (STclear), 9 (SYctd), 26 (STcloudy)
6: Spettri nel test set di ott.	27 (cieli sereni), 15 (SYctd), 40 (STcloudy)
7: Somma minima tra accuratze relative	2.0
8: Differenza massima tra accuratze relative	0.2
9: Tipo di kernel	lineare

Tabella 5.13: Tabella che illustra i parametri estrinseci utilizzati per il run di controllo del secondo caso studio.

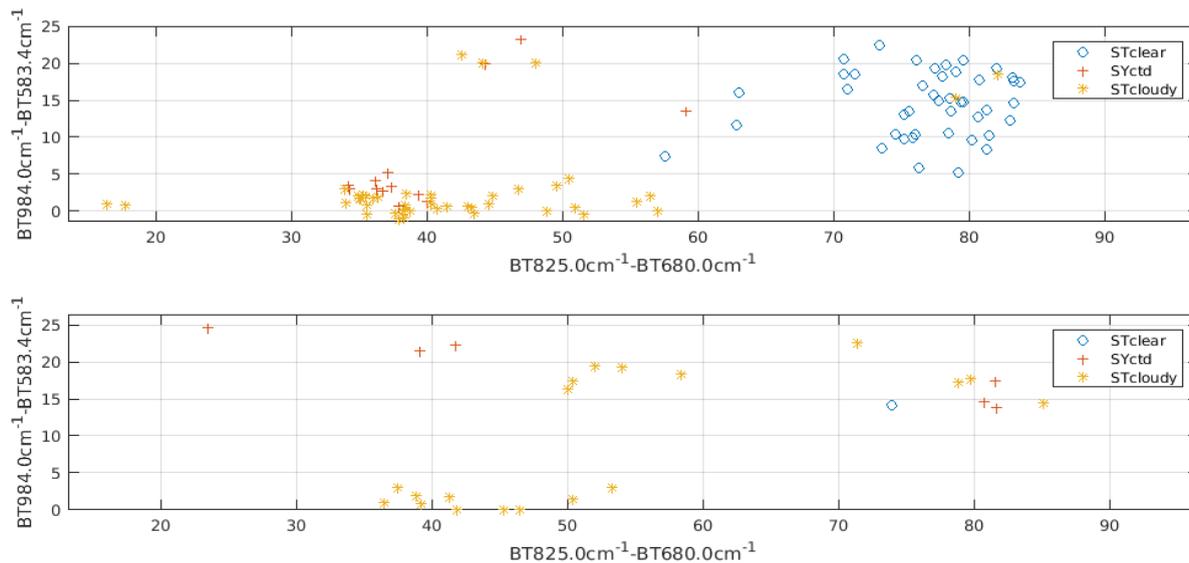


Figura 5.13: Scatter plot relativo al run di controllo del secondo caso studio.

Rispetto al caso studio precedente, la differenza più evidente è che **il numero di elementi nel training set e nel test set di ottimizzazione è molto più elevato** in rapporto al numero di elementi nel dataset (pari a 263 in questo caso).

La classificazione di questo caso studio è infatti molto più difficile per ICICLE, e sono necessari molti spettri perché i modelli creati dalla Support Vector Machine siano sufficientemente precisi.

Il numero di canali utilizzati è **anch'esso più basso**. Questo perché nel primo caso studio si è osservato che l'utilizzo di canali molto rumorosi porta a una diminuzione delle accuratèzze. **Per lo stesso motivo, la media mobile non è stata effettuata**.

È da rilevare inoltre che **per le classificazioni a 3 classi ICICLE non prevede ancora la presenza di casi esclusi dalla classificazione e un criterio opzionale per scegliere come massimizzare le accuratèzze relative**. Per questo motivo, i parametri relativi a queste opzioni non sono indicati.

Come si può osservare nella figura 5.12, **le accuratèzze relative risultano più elevate utilizzando il lontano infrarosso**. Inoltre, tali accuratèzze relative **non diminuiscono in modo significativo eliminando i canali più rumorosi**.

Per osservare le reazioni di ICICLE a una variazione dei parametri estrinseci nella delicata situazione del secondo caso studio, **sono stati lanciati due run paralleli**.

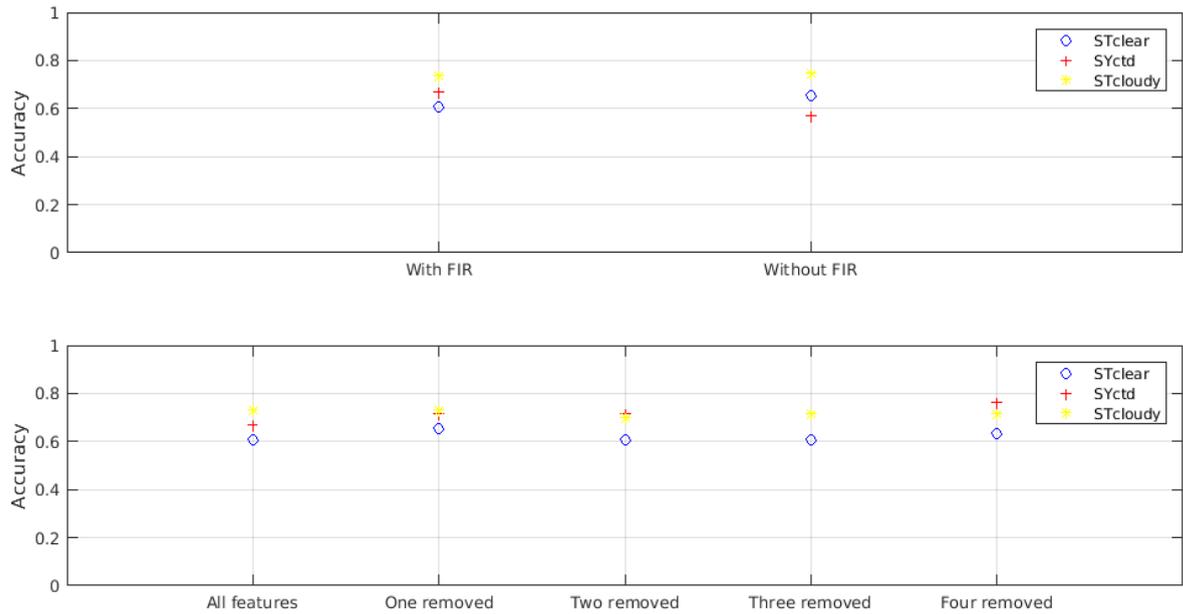


Figura 5.14: Plot delle accuratze relativo al primo run parallelo del secondo caso studio.

5.3.3 Primo run parallelo: kernel gaussiano

Come si può osservare in figura 5.13, gli spettri della classe SYctd e della classe STcloudy **sono distribuiti come gli spettri rappresentati nella figura 4.15**. Come è stato evidenziato nella Sezione 4.3.2, questo tipo di spettri è classificato in modo ottimale **tramite un kernel di tipo gaussiano**. Si è quindi tentato di osservare se le accuratze relative aumentassero utilizzando gli stessi parametri del run di controllo, eccetto il kernel.

Run parallelo 1 (caso studio 2)	
Parametro	Valore
1: Numero canali massimo e minimo	19 e 14 (standard)
2: Numero canali nel MIR	11 (standard)
3: Errore sulla radianza	1%
4: Numero di canali per la media	1
5: Spettri nel training set	18 (STclear), 9 (SYctd), 26 (STcloudy)
6: Spettri nel test set di ott.	27 (cieli sereni), 15 (SYctd), 40 (STcloudy)
7: Somma minima tra accuratze relative	2.0
8: Differenza massima tra accuratze relative	0.2
9: Tipo di kernel	gaussiano

Tabella 5.14: Tabella che illustra i parametri estrinseci utilizzati per il run di controllo del secondo caso studio.

Utilizzando il kernel gaussiano, le accuratze non sono sempre elevate come nel run di controllo, ma risultano meno sensibili al numero di canali utilizzati.

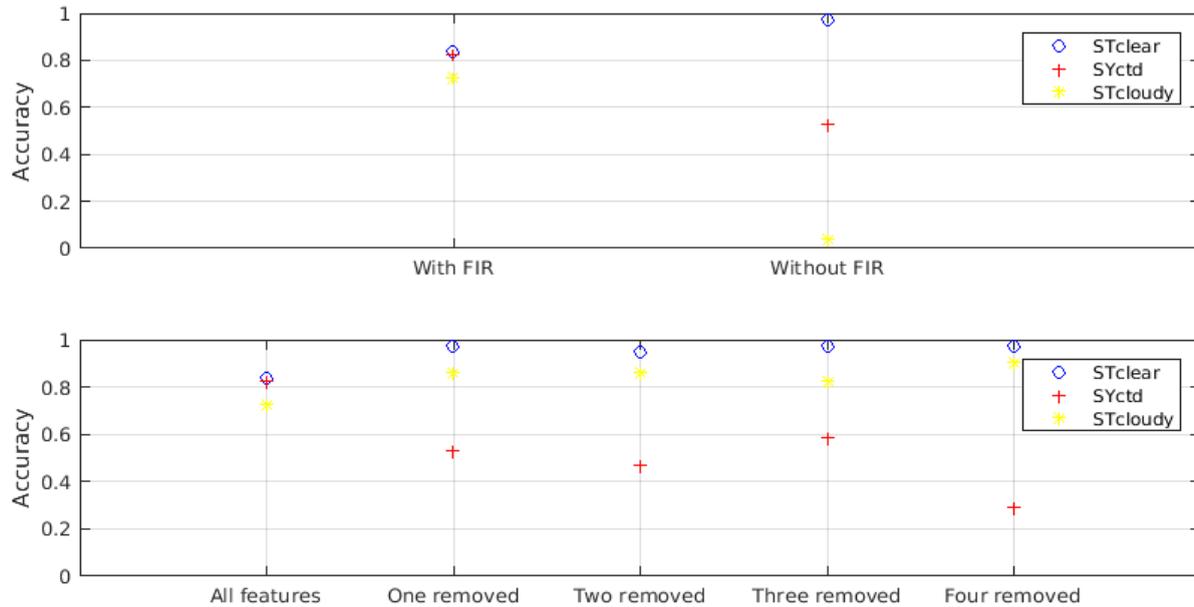


Figura 5.15: Plot delle accuratze relativo al secondo run parallelo del secondo caso studio.

5.3.4 Secondo run parallelo: ricerca di parametri ottimali

Nel lanciare ulteriori run paralleli si è tentato di osservare se **ICICLE reagisse in modo positivo a un insieme di parametri molto differente**. Nel secondo run parallelo, rispetto al run di controllo, l'errore sulle radianze è stato dimezzato, la differenza tra accuratze massima ammessa è stata aumentata, il training set è stato notevolmente ampliato e il test set di ottimizzazione è stato ridotto.

Run parallelo 2 (caso studio 2)	
Parametro	Valore
1: Numero canali massimo e minimo	19 e 14 (standard)
2: Numero canali nel MIR	11 (standard)
3: Errore sulla radianza	0.5%
4: Numero di canali per la media	1
5: Spettri nel training set	36 (STclear), 18 (SYctd), 52 (STcloudy)
6: Spettri nel test set di ott.	18 (cieli sereni), 9 (SYctd), 26 (STcloudy)
7: Somma minima tra accuratze relative	2.0
8: Differenza massima tra accuratze relative	0.3
9: Tipo di kernel	lineare

Tabella 5.15: Tabella che illustra i parametri estrinseci utilizzati per il secondo run parallelo del secondo caso studio. I parametri modificati rispetto al run di controllo sono evidenziati in neretto.

I risultati ottenuti, in questo caso, **sono relativamente buoni** (figura 5.15). Al contrario, in altri 7 run paralleli la modifica dei parametri rispetto al run di controllo **ha portato a un drastico calo delle accuratze relative**. Questo fatto è probabilmente dovuto **alla limitatezza del dataset**.

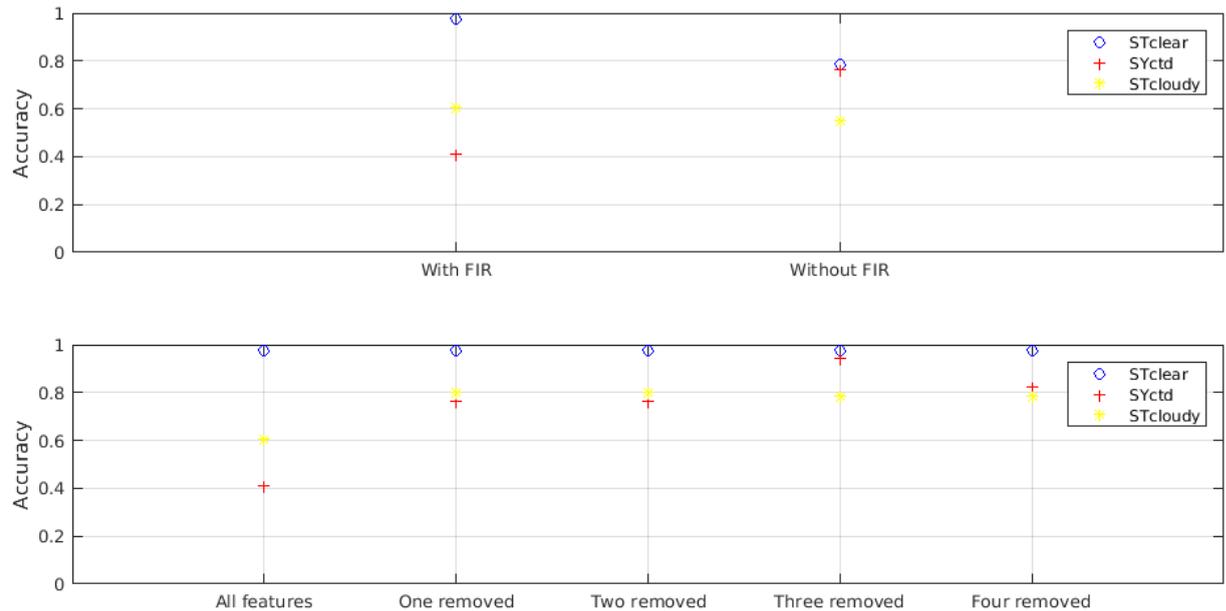


Figura 5.16: Plot delle accuratze relativo al terzo run parallelo del secondo caso studio.

5.3.5 Terzo run parallelo: ancora kernel gaussiano

Tramite il terzo run parallelo si è voluto verificare se utilizzando gli stessi parametri del run precedente, modificando il solo kernel, i risultati migliorassero (come nel primo run parallelo). **Anche in questo caso, la classificazione risulta più stabile:** il numero di canali utilizzati sembra avere una scarsa influenza sulle accuratze (figura 5.16).

Run parallelo 3 (caso studio 2)	
Parametro	Valore
1: Numero canali massimo e minimo	19 e 14 (standard)
2: Numero canali nel MIR	11 (standard)
3: Errore sulla radianza	0.5%
4: Numero di canali per la media	1
5: Spettri nel training set	36 (STclear), 18 (SYctd), 52 (STcloudy)
6: Spettri nel test set di ott.	18 (cieli sereni), 9 (SYctd), 26 (STcloudy)
7: Somma minima tra accuratze relative	2.0
8: Differenza massima tra accuratze relative	0.3
9: Tipo di kernel	gaussiano

Tabella 5.16: Tabella che illustra i parametri estrinseci utilizzati per il secondo run parallelo del secondo caso studio. I parametri modificati rispetto al run di controllo sono evidenziati in neretto.

Sezione 6

Conclusioni

Nel 1997, con il progetto REFIR, è iniziato il lungo percorso culminato con la candidatura di FORUM al bando Earth Explorer 9 dell'agenzia spaziale europea. In Italia è nato il progetto SCIEF (Sviluppo delle Competenze Italiane per l'Esperimento FORUM), a cui ha partecipato il relatore di questa tesi. Nell'ambito del progetto SCIEF, è stato necessario dimostrare che il FIR (far infrared) apporta un contributo informativo significativo per il retrieval delle proprietà delle nubi. Tale dimostrazione rappresenta il primo obiettivo del presente lavoro. Il secondo obiettivo, più ambizioso e complesso, è stato lo sviluppo di un codice che permettesse di identificare e classificare le nubi secondo le loro proprietà, senza l'utilizzo di un modello inverso. Dato che il progetto SCIEF è suddiviso in casi studio climatologici, il presente lavoro è stato incentrato su dei casi assegnati (caso tropi. Si è dunque dato grande peso agli spettri simulati in aree tropicali dell'emisfero settentrionale, nelle notti invernali.

Il primo obiettivo è stato espletato nella sezione 4, con gli studi di sensibilità. Si è mostrato che la banda rotazionale del vapore acqueo filtra il segnale proveniente dalla superficie, e questo fatto può essere d'aiuto nella distinzione tra il segnale generato dalla presenza di un cirro sottile e quello dato da una diminuzione della temperatura superficiale. È stato dimostrato che nel lontano infrarosso i segnali relativi alla forma dei cristalli di ghiaccio sono di intensità maggiore rispetto ai segnali nel medio infrarosso. Anche la dimensione dei cristalli di ghiaccio presenta alcune caratteristiche peculiari nel FIR, sebbene il segnale abbia un'intensità nettamente superiore nella finestra principale dell'infrarosso. Anche la fase delle nubi ha un segnale molto peculiare nel FIR, a causa dell'andamento delle parti immaginarie degli indici di rifrazione dell'acqua in fase liquida e solida.

Il secondo obiettivo è stato espletato con lo sviluppo di ICICLE (Ice Cloud Identification and Classification through Longwave Emission), un codice in linguaggio Matlab basato sulle Support Vector Machine, un algoritmo ad apprendimento automatico. ICICLE effettua la propria classificazione su basi non probabilistiche, e il modello che esso genera è completamente indipendente dal modello diretto. Questi presupposti danno ad ICICLE una grande flessibilità e ne hanno reso semplice lo sviluppo. La varietà di impostazioni, descritte accuratamente nella sezione 4, permettono all'utente di adattare il codice a molte situazioni e di includere un errore a posteriori negli spettri simulati.

Nella sezione 5, tramite l'analisi dei run nei due casi studio esaminati, si è studiato il comportamento di ICICLE al variare dei *parametri estrinseci*, così definiti perché influenzano la classificazione in modo indiretto. È stato verificato che il comportamento di ICICLE al variare di tali parametri rientra nelle attese. Nella stessa sezione, si nota inoltre come l'accuratezza delle classificazioni risulti generalmente

maggiore includendo il FIR nell'analisi dei dati.

In sintesi, nel presente lavoro è stato dimostrato che nel lontano infrarosso sono contenute molte informazioni utili a una più efficiente identificazione e classificazione delle nubi. È stato inoltre dimostrato che ICICLE, il codice di identificazione e classificazione delle nubi, è funzionante ed è pronto all'utilizzo.

Appendice tecnica A

Guida all'uso di RT3

Per il lettore interessato alla procedura esatta tramite cui sono stati creati gli spettri, può essere utile leggere questa appendice tecnica. Essa è stata concepita per guidare gli eventuali utenti al lancio di nuove simulazioni. Tramite questa guida si vuole inoltre esporre il lavoro effettuato dal sottoscritto nella stesura di script funzionanti in bash e in fortran.

Il lancio delle simulazioni di RT3 avviene tramite degli script in bash. Nonostante degli script fossero già stati scritti, essi non erano del tutto adeguati data la mole di lavoro richiesta. Per questo motivo sono stato costretto a modificarli, creando una vera e propria interfaccia che permette di lanciare rapidamente numerosi run alla volta. A questo scopo, gli script originari sono stati ampliati e ne sono stati creati di nuovi.

Data la complessità della procedura di lancio, si è deciso di riassumerla ordinatamente nello schema sottostante:

1. Si lancia lo script *avvio* tramite l'alias di linux *rt3*.
2. Lo script *avvio* chiede all'utente se vuole scegliere un nuovo profilo di LbLRTM tramite cui effettuare una simulazione. In caso la risposta sia negativa, lo script avvia automaticamente un numero di simulazioni pari al numero di profili disponibili, con i dati di nube utilizzati nel run precedente.
3. Se l'utente ha risposto affermativamente alla richiesta precedente, lo script *avvio* domanda all'utente se desidera utilizzare gli stessi dati di nube utilizzati nella simulazione precedente al nuovo profilo.
4. Se l'utente ha risposto negativamente, lo script *ODtoIWC.f* viene compilato e l'eseguibile relativo viene lanciato. Tale eseguibile chiede all'utente di inserire il file di scattering e i dati di base, top e spessore ottico della nube, oltre alla temperatura superficiale desiderata. Tramite tali dati l'eseguibile calcola l'IWC e salva nel file *input.dat* i dati di base, top e IWC della nube, oltre alla temperatura superficiale.
5. Se l'utente ha risposto negativamente alla prima richiesta, invece, lo script *avvio* crea un file contenente i nomi di tutte le cartelle al cui interno è presente un file *fkext.dat*.
6. Quali che siano state le scelte dell'utente, al termine di queste operazioni lo script *avvio* lancia *screenx-scief-br-v1.sh*. Nel caso in cui l'utente abbia scelto di effettuare una simulazione per ciascun profilo disponibile, *screenx-scief-br-v1.sh* viene lanciato tante volte quanti sono i profili disponibili.

7. Lo script `screenx-scief-br-v1.sh` legge i dati contenuti nel file `input.dat` e modifica secondo questi il file `profilo` relativo alla prossima simulazione.
8. Lo script `screenx-scief-br-v1.sh` crea una struttura ad albero all'interno delle cartelle in cui sono presenti i file di input per la simulazione. La prima cartella ha un nome uguale a quello della temperatura superficiale scelta. All'interno di tale cartella vengono create due sottocartelle. La prima, chiamata *profili*, contiene tutti i profili relativi alle simulazioni fatte con un certo file `fkext.dat` e con una certa temperatura superficiali. La seconda ha un nome in codice che include il file di scattering utilizzato, la quota della base e del top della nube inserita e il suo spessore ottico.
9. Lo script `screenx-scief-br-v1.sh` lancia `rt3-scief-br-v1.sh`, che a sua volta lancia il run di RT3.

A seguito del completamento del run, l'utente è libero di lanciare lo script `copiarad.sh` che copia tutti i file ASCII contenenti le radianze (il cui nome è *outrt*) in un'unica cartella, cambiando allo stesso tempo il loro nome. Per dare un'idea della struttura delle cartelle si farà un esempio. Supponiamo di aver fatto una simulazione con i seguenti input:

- I file `fkext.dat` e *profilo* si trovano nella cartella `IG2_TRO_NO_WI_NI`.
- La temperatura superficiale scelta è stata di 300.93 K.
- La nube scelta ha la base a 12 km di quota, il top a 13 km di quota, uno spessore ottico pari a 0.03 e il file di scattering che la caratterizza è `STsolc0r20v01`.

Il percorsi per trovare i vari file saranno i seguenti:

- Il file di output di RT3 si troverà al percorso:
`IG2_TRO_NO_WI_NI/3.009300E+02/STsolc0r20v01_OD_0.50_B_12000_T_13000/outrt`.
- Il file che contiene il profilo si troverà al percorso:
`IG2_TRO_NO_WI_NI/3.009300E+02/profili/STsolc0r20v01_OD_0.50_B_12000_T_13000.prof`.
- Il file che contiene le radianze copiate tramite il file `copiarad.sh` si troverà al percorso:
`IG2_TRO_NO_WI_NI/3.009300E+02/radianze/STsolc0r20v01_OD_0.50_B_12000_T_13000.rad`.

L'ordine nella struttura delle cartelle e nei nomi dei file è molto importante per individuare eventuali errori e per riconoscere l'identità delle simulazioni in fase di analisi. Il funzionamento di ICICLE (Ice Cloud Identification and Classification through Longwave Emission), il codice elaborato dal sottoscritto atto all'identificazione e alla classificazione delle nubi, funziona adeguatamente solo se la struttura dei nomi dei file che contengono gli spettri è quella ottenuta nel modo descritto sopra.

Appendice tecnica B

Guida all'uso di ICICLE

Vale la pena descrivere nel dettaglio le funzionalità e le modalità d'uso di ICICLE, sia per dare la possibilità al lettore di comprendere più profondamente i risultati ottenuti nella fase di analisi dei dati, sia per esporre i ragionamenti effettuati dal sottoscritto a una critica costruttiva.

È importante sottolineare che la versione di ICICLE qui descritta, la cui ultima modifica risale al 28 agosto 2017, è stata fatta su misura per espletare il lavoro richiesto per questa tesi. Ad esempio, ICICLE tiene conto nelle sue routine che il numero di canali in un file di radianza regolare deve essere pari a 4996, che la risoluzione dello strumento sia pari a 0.3 cm^{-1} e che l'unità di misura dei numeri d'onda sia in cm^{-1} . Se l'utente desiderasse effettuare una classificazione sulla base di spettri caratterizzati da un numero di canali e da una risoluzione variabile, sarebbe costretto a effettuare modifiche al codice sorgente.

B.1 Il file `Input.dat` e la subroutine *Lettura degli Input*

Il primo passo per comprendere il funzionamento del codice è la descrizione di tutte le impostazioni presenti all'interno del file `Input.dat`. Tali impostazioni non solo permettono di effettuare run completamente personalizzati, ma anche di far funzionare il codice correttamente nella propria macchina senza che l'utente sia obbligato a modificare il codice sorgente.

Il file è scritto in italiano ed è suddiviso in otto sezioni, ciascuna delle quali contiene impostazioni relative a un aspetto del codice.

B.1.1 Prima sezione: canali e feature

Nella *prima sezione* sono contenute la maggior parte delle informazioni relative ai canali di RFTS da utilizzare per il run e alla natura delle feature che si desidera utilizzare. La prima impostazione di questa sezione (detta impostazione 1 nel file `Input.dat`) è un vettore contenente i canali, il cui nome all'interno del codice è proprio *canali*. Tali canali devono essere indicati tramite numero d'onda in cm^{-1} . La seconda impostazione (1a) è un numero naturale, ed è definita *nfeat* all'interno del codice. **Essa indica ad ICICLE quante feature utilizzare rispetto al totale disponibile. Le feature possono essere le temperature di brillantezza o le differenze tra temperature di brillantezza relative ai canali di RFTS.** Si sottolinea quindi come **non necessariamente un run di ICICLE sfrutta tutte le**

```

DATI DI INPUT PER ICICLE (file di 131 righe)
-----
Valido per matlab glnx64 2016a e matlab glnx64 2017a.
-----
----- CANALI E FEATURE -----
1. Vettore dei canali (numero d'onda). [canali]
294.5 366 388.5 410 439 457.5 472.5 497 531.6 560 583.4 680 825 862 900 950 984 1095 1130 1160 1285.2 1384
1a. Numero di feature da utilizzare tra quelle presenti (corrispondono ai canali) [nfeat]
22
1b. Flag logico per indicare se confrontare i risultati ottenuti utilizzando il solo MIR e tutto l'infrarosso [l_mir]
1
1c. Indicare i canali nel medio infrarosso piú eventuali canali nella banda della CO2 [canali_MIR]
680 825 862 900 950 984 1095 1130 1160 1285.2 1384
1d. Flag logico per indicare se si vogliono utilizzare i canali (0) o le differenze tra canali (1) come feature per la Support Vector Machine. Le differenze tra canali utilizzate saranno quelle inserite per effettuare i plot (vedi piú in basso).[l_diff]
0
1e. Flag logico per indicare se si vuole effettuare l'analisi dei dati per piú di un numero di feature. Tali analisi verranno effettuate rimuovendo di volta in volta una feature. Accanto al flag logico, inserire il numero minimo di feature da utilizzare.[l_totcalc]
1 18

```

Figura B.1: Prima sezione del file Input.dat. Alla fine di ogni descrizione, tra parentesi quadre, è indicato il nome della variabile utilizzato in ICICLE.

feature indicate nell'impostazione 1.

La variabile *nfeat* può essere uguale o inferiore al numero di feature indicate implicitamente nel file Input.dat tramite il vettore *canali* o il vettore *chans_plot_1* (descritto piú avanti). **Nel caso in cui *nfeat* fosse inferiore alla lunghezza del vettore contenente le feature del run, sarà il codice a decidere quali saranno le feature scelte tra le tante indicate.**

Infatti, ICICLE effettuerà la sua classificazione di default scegliendo tra tutte le possibili combinazioni di *nfeat* canali su un totale di *nchan* quella che possiede il maggior contenuto informativo, **secondo un criterio stabilito all'interno della subroutine *Ottimizzazione***. È quindi possibile, ad esempio, porre *nfeat* uguale a 4 pur avendo inserito 6 canali nell'impostazione 1a. Il codice provvederà a scegliere quale quartetto di canali scegliere tra i 6 disponibili, confrontando il contenuto informativo delle 15 combinazioni possibili.

La terza impostazione (1b) è un *flag logico*, vale a dire una variabile booleana che indica al codice se effettuare o meno una certa operazione. Tale variabile è detta l_{MIR} all'interno di ICICLE. **Se impostata su 1 (vero), il codice effettua un ulteriore ciclo oltre a quello di default**, in cui la classificazione degli spettri viene espletata utilizzando i soli canali nel medio infrarosso. **I canali nel medio infrarosso da utilizzare possono essere scelti liberamente dall'utente tramite la quarta impostazione (1c).**

Nonostante le impostazioni 1b e 1c siano state pensate per effettuare confronti tra il MIR e tutto l'infrarosso, **l'utente può scegliere la combinazione di canali che piú lo aggrada per effettuare questi confronti**. Ad esempio, può essere interessante osservare come cambia la classificazione rimuovendo un certo numero di canali nella banda rotazionale del vapore acqueo. Le didascalie dei grafici dovranno tuttavia essere modificate.

```

----- ERRORE SULLA RADIANZA -----
2. Flag per indicare se utilizzare un errore nei dati [l_rand]
1
SEZIONE 1 - ANALISI DEI DATI
2a. Valore dell'errore in rapporto al valore della radianza [err_stdv]
0.01
----- RIDUZIONE ERRORE -----
3. Flag per indicare se utilizzare il valore medio dei canali attorno al numero d'onda centrale dato al punto 1 [l_med]
1
3a. Numero di canali da utilizzare per effettuare tale media [nummed]
5
----- CLASSI DA IDENTIFICARE -----
4. Numero di classi da distinguere (2 o 3) [n_classi]
3
4a. Classi da distinguere (indicare tramite parti dei nomi dei file *.rad). Si indichi l'ultima classe con "tuttoilresto" [classi]
SIclear OD_0.0 tuttoilresto

```

Figura B.2: Seconda, terza e quarta sezione del file Input.dat.

La quinta impostazione (1d) è anch'essa un flag logico, chiamato l_{diff} . Tramite di essa, **l'utente può imporre al codice di utilizzare i canali ($l_{diff} = 0$) o le differenze di canali ($l_{diff} = 1$) per effettuare la classificazione degli spettri**. La sesta impostazione è la combinazione di un flag logico, chiamato $l_{totcalc}$, e di numero naturale, chiamato *minim*. Tramite di essa, l'utente potrà decidere se effettuare ulteriori cicli ($l_{totcalc} = 1$) facendo scendere di volta in volta il numero di feature da utilizzare, fino a un valore minimo pari a *minim*.

B.1.2 Seconda sezione: errore sulla radianza

Nella *seconda sezione* del file Input.dat sono contenute le informazioni relative all'errore sulla radianza da inserire. La prima impostazione (2) di questa sezione è un flag logico, l_{rand} , che permette all'utente di decidere se inserire un errore sulla radianza ($l_{rand} = 1$) o meno ($l_{rand} = 0$). La seconda impostazione (2a) **quantifica tale errore in rapporto al valore assoluto della radianza**. L'errore generato è di tipo gaussiano e il valore della seconda impostazione è uguale alla deviazione standard della distribuzione gaussiana associata ai valori di radianza. È bene sottolineare che **nel caso in cui l_{rand} sia uguale a 1, il valore di radianza in ciascun canale di RFTS sarà affetto da un errore che segue la stessa distribuzione gaussiana, ma il cui valore sarà diverso da quello di ogni altro canale**. Tramite queste impostazioni, l'utente potrà verificare l'impatto di un errore nei valori di radianza sull'accuratezza della classificazione.

B.1.3 Terza sezione: riduzione dell'errore

Nella *terza sezione* sono contenute due impostazioni per ridurre l'errore. La prima (3) è un flag logico, l_{med} , **che permette all'utente di decidere se ridurre l'errore effettuando una media sui canali attorno a quelli scelti ($l_{med} = 1$)**. La seconda (3a), invece, è un numero naturale che indica al codice il numero di canali *nummed* su cui effettuare tale media. L'errore sarà ridotto di un fattore \sqrt{nummed} . **Tramite queste impostazioni, l'utente potrà verificare se effettuare la media su un certo numero di canali riduce l'impatto dell'errore sull'accuratezza della classificazione**.

```

----- CARTELLE -----
5a. Cartella dove è contenuto il codice ICICLE [CodeDir]
~/Scrivania/Test/Codict/ICICLE
5b. Cartella dove è contenuto libsvm [libsvmDir]
~/Scrivania/Test/Codici/libsvm-3.22/matlab
5c. Cartella dove sono contenuti i file *.rad [WorkingDir]
~/Scrivania/Test/Spettri/CALCOLI/SCIEF

----- IMPOSTAZIONI PER LIBSVM -----
6a. Valore minimo del logaritmo in base 2^(1/4) del costo per effettuare la cross validation (tendenzialmente elevato, maggiore di 20) [mncosto]
20
6b. Valore massimo del logaritmo in base 2^(1/4) del costo per effettuare la cross validation (tendenzialmente molto elevato, maggiore di 80) [maxcosto]
100
6c. Valore minimo del logaritmo in base 2^(1/4) di gamma per effettuare la cross validation (tendenzialmente basso, minore di -80) [mingamma]
-180
6d. Valore massimo del logaritmo in base 2^(1/4) di gamma per effettuare la cross validation (tendenzialmente non elevato, intorno a 0 o meno. I tempi di calcolo aumentano in modo esponenziale all'aumentare di questo valore) [maxgamma]
-30
6e. Frazione dei membri di ciascuna classe da usare per il test set di ottimizzazione [fractest_ott]
0.3 0.3 0.3
6f. Frazione dei membri di ciascuna classe da usare per il training set [fractrain]
0.1 0.1 0.1

```

Figura B.3: Quinta e sesta sezione del file Input.dat.

B.1.4 Quarta sezione: classi

La *quarta sezione* contiene due impostazioni per la definizione delle classi. La prima (4) è il numero di classi in cui suddividere il dataset, che può essere pari a 2 o a 3. La seconda impostazione (4a) è un array che contiene un numero di stringhe pari al numero di classi (il nome dell'array è appunto *classi*). Ciascuna stringa dell'array deve identificare una classe di file, secondo il nome completo del percorso in cui sono contenuti. Ad esempio, se si volesse classificare gli spettri in atmosfere contenenti cirri composti da colonne esagonali e in atmosfere contenenti cirri composti da piatti esagonali, le due stringhe dovranno essere *solc* e *plat*. Per comprendere appieno la motivazione di questo fatto, è conveniente rileggere la sezione A.

B.1.5 Quinta sezione:cartelle

La *quinta sezione* è dedicata al corretto funzionamento del codice all'interno della macchina utiizzata. In tale sezione sono definite tre impostazioni, tutte e tre percorsi in formato stringa di testo. La prima impostazione (5a) è il percorso dove è contenuto il codice (*CodeDir*), la seconda (5b) è il percorso dove è contenuta la cartella matlab del pacchetto libsvm sviluppato dai ricercatori Chih-Wei Hsu, Chih-Chung Chang e Chih-Jen Lin dell'università di Taiwan (*libsvmDIR*). La terza (5c), infine, è il percorso dove sono contenuti gli spettri (*WorkingDir*).

B.1.6 Sesta sezione: impostazioni per libsvm

La *sesta sezione* contiene sei impostazioni relative alla *Support Vector Machine*. Tramite tali impostazioni possono essere determinati i valori minimi e massimi del logaritmo in base $2^{1/4}$ di C e di γ , nonché la frazione rispetto al totale del *training set* e del *test set di ottimizzazione*.

```

----- IMPOSTAZIONI PLOT E DIFFERENZE DI CANALI -----
7a. Flag logico per indicare se si vuole effettuare il plot delle accuratze [_l_plot_1]
1
7b. Flag logico per indicare se si vuole effettuare gli scatter plot relativi a certe differenze di canali [_l_plot_2]
0
7c. Indicare le coppie di canali da plottare nelle due righe sottostanti. Se si vuole fare una classificazione dove le feature sono le differenze di canali, inserirle qui. Attenzione: si inseriscano solo differenze tra canali già indicati al punto 1 [chans_plot_1] [chans_plot_2]
583.4 583.4 680.0 680.00 950.00 294.5 294.5 950 825 825.00 825 1160
410.0 862.0 950.0 1130.0 1130.0 583.4 410.0 366 900 1130.0 680 1095
7d. Indicare le coppie di canali nel solo medio infrarosso (più la banda della CO2) [chans_plot_MIR_1] [chans_plot_MIR_2]
680.0 680.00 950.00 825 825.00 825 1160
950.0 1130.0 1130.0 900 1130.0 680 1095
----- AGGIUNTE EVENTUALI -----
8. Nel caso non si voglia analizzare l'intero dataset, inserire le stringhe che caratterizzano i file che si vogliono scegliere. Per selezionarli tutti, scrivere /S nella riga sotto [stringascelta]
/S
8a. Flag logico che indica se eliminare i file che contengono le stringhe sopra (0) o se invece includere solo loro (1) [_l_tolg]
1
9. Somma minima e differenza massima tra le accuratze ammessa nella fase di cross validation [minmax] ovvero [minsum] e [maxdiff]
2.3 0.4
10. Parametro per indicare la tolleranza nel determinare i casi non classificabili (solo per nclassi=2). Più è alto, più la tolleranza è alta. Valore di base: 1 [param]
0.1
11a. Flag logico. Impostare a 0 per cambiare il training set e il test set a ogni nuovo run. Impostare a 1 per leggere le matrici di brightness temperature da dei file [_l_readBT]
0
11b. Percorso che contiene le matrici di brightness temperature [BTdir]
~/Scrivania/Testi/Codici/ICICLE/ERROR_0.5_PERCENT/CHANNELS/NCH_20_NFEATMAX_19/STclear_91_STcloudy_849_TOT940
12a. Flag per indicare se sono stati compilati i codici del pacchetto libsvm [_l_comp]
1

```

Figura B.4: Settima e ottava sezione del file Input.dat.

B.1.7 Settima sezione: grafici

La *settima sezione* è dedicata ai grafici. La prima impostazione (7a) di tale sezione è un flag logico, che permette all'utente di scegliere se effettuare un plot delle accuratze o meno. La seconda impostazione (7b) è pure un flag logico, che lascia decidere all'utente se effettuare gli scatter plot relative a determinate differenze di canali. **L'impostazione successiva (7c) ha un duplice utilizzo.** Nel caso in cui l'utente abbia deciso di utilizzare come feature le temperature di brillantezza relative ai canali di RFTS, la terza impostazione racchiude semplicemente le differenze di canali da utilizzare per effettuare gli scatter plot. **Se l'utente avesse deciso di utilizzare le differenze tra temperature di brillantezza come feature**, la terza impostazione viene utilizzata **per definire le differenze tra temperature di brillantezza da utilizzare come feature** (oltre che per gli scatter plot). La quarta impostazione (7d) racchiude le differenze di canali nel solo medio infrarosso, che effettuano un ruolo analogo alla quarta impostazione della prima sezione, nel caso in cui le feature scelte siano le differenze tra temperature di brillantezza.

B.1.8 Ottava sezione: miscellanea

L'*ottava sezione* è una miscellanea ed è stata concepita per raccogliere qualsiasi impostazione sia stata ideata dopo le precedenti, nonché impostazioni aggiuntive ideate dai nuovi utenti. Nell'ultimo aggiornamento del file Input.dat (28 agosto 2017), questa sezione contiene sette impostazioni. La prima (8) è un array di stringhe che indica al codice **quali spettri prendere in considerazione nella classificazione** (*stringascelta*). Se tale stringa è contenuta nei nomi di tutti

i percorsi relativi agli spettri, allora saranno presi in considerazione tutti i file per la classificazione. Altrimenti, ne sarà preso in considerazione solo un numero limitato. La seconda impostazione è un flag logico, chiamato l_{tolg} , **che permette di invertire la funzione di *stringascelta***. Nel caso in cui $l_{tolg} = 1$, infatti, *stringascelta* conterrà le stringhe di testo relative agli **spettri che si desidera rimuovere dall'analisi**.

Le due impostazioni successive (9,10) riguardano la *Support Vector Machine* e se ne parlerà più avanti per non confondere le idee. La quinta impostazione (11a) è un flag logico, **che indica al codice se utilizzare delle matrici di temperatura di brillantezza già esistenti leggendole da un file ASCII, evitando quindi di effettuare l'operazione di rimescolamento prevista dal codice per attuata per ridurre il bias** 4.3.3. La sesta impostazione (11b) è il percorso in cui sono contenuti tali file. La settima impostazione (12a), indica al codice se la compilazione del codice del pacchetto *libsvm* è già avvenuta o meno. In caso negativo, essa sarà effettuata nel run successivo. L'ottava impostazione (13) è una stringa di testo che contiene il nome della cartella del run attuale all'interno della cartella del caso studio. La nona e la decima impostazione (14 e 14a), **sono molto importanti**. Tramite di esse è possibile selezionare il proprio criterio di bontà della classificazione: **massima somma delle accuratezze relative o massima accuratezza relativa a una classe**. L'undicesima impostazione (15) **indica il tipo di kernel da utilizzare per la classificazione**. È possibile scegliere tra kernel lineare e kernel gaussiano (radial basis function).

B.1.9 Conclusioni

Come si può constatare, ICICLE è un codice molto flessibile grazie alla quantità di impostazioni di cui dispone.

Sono presenti 3 flag logici influenti sui calcoli (*ldiff, lrand, lmed*) che danno la possibilità all'utente di verificare l'impatto della scelta delle feature e dell'inserzione di un errore sull'accuratezza delle classificazioni. È possibile suddividere gli spettri sia in 2, sia in 3 classi. **La scelta della suddivisione in 3 classi può rivelarsi particolarmente utile nel caso in cui sia presente una transizione continua tra due casistiche, ad esempio tra cielo sereno e cielo nuvoloso**. In questo caso, la terza classe rappresenta i casi che possiedono alcuni aspetti della prima classe e alcuni aspetti della seconda. **Nell'esempio precedente, tale classe è ben rappresentata dai cirri *subvisible***. Oltre a questo, all'utente sono affidate numerose impostazioni di tipo quantitativo, che potranno permettergli di studiare la sensibilità dell'accuratezza della classificazione a un certo parametro.

B.2 La subroutine *Conteggio Classi*

La seconda subroutine di ICICLE esegue il conteggio delle classi definite dalle stringhe di testo nel file *Input.dat*. Per effettuare il conteggio delle classi, viene eseguito un ciclo su tutti gli spettri presenti nella cartella *WorkingDir*. **Se una delle stringhe di testo nell'array *classi* definito nel file *Input.dat* è contenuta nel nome di un file, il contatore relativo alla classe corrispondente viene incrementato di uno**. Inoltre, **il conteggio viene effettuato se e solo se il nome del file contiene tutte le stringhe dell'array *stringascelta* (nel caso in cui $l_{tolg} = 0$): in questo modo, il numero di spettri presi in considerazione può essere limitato a seconda dei desideri dell'utente**. Ad esempio, dato che il segnale dovuto all'*habit* dei cristalli di ghiaccio è relativamente basso se i cristalli sono piccoli e se lo spessore ottico della nube è molto basso, può essere utile prendere

in considerazione solo nubi otticamente spesse o caratterizzate da cristalli molto grandi. Inoltre, **vale la pena segnalare il fatto che *stringascelta* può contenere stringhe relative non solo al nome del file, ma anche all'intero percorso.** Quindi, se lo si desidera, potranno essere esclusi degli interi casi studio. Può essere utile, ad esempio, osservare cosa accade se si includono solo casi studio contenenti profili IG2 o contenenti solo profili ECMWF.

B.3 La subroutine *Letture e Conversione*

La subroutine *Letture e Conversione* legge i dati contenuti all'interno dei file presenti nella cartella *WorkingDir* e li converte in temperature di brillanza.

Prima della conversione del dato grezzo in temperature di brillanza, vengono effettuate alcune operazioni. Anzitutto, **se il flag logico l_{rand} è uguale a 1, al valore grezzo di radianza di ogni canale viene aggiunto un errore di tipo gaussiano** con deviazione standard indicata nel file *Input.dat*. All'interno di Matlab non è disponibile una funzione che crei una variabile aleatoria normale. È tuttavia presente la funzione *rand*, che crea una variabile aleatoria di tipo uniforme. Essa, grazie al teorema del limite centrale, può essere trasformata in una variabile aleatoria normale. **Questa trasformazione è possibile calcolando la media di un grande numero di variabili aleatorie uniformi identicamente distribuite: tale media seguirà una distribuzione normale.** Il numero di variabili su cui viene effettuata la media è interno al codice e non può essere modificato tramite il file *Input.dat*.

I dati affetti da errore possono risultare molto rumorosi e difficili da classificare. A questo scopo, il codice permette all'utente di effettuare la media su n canali adiacenti a quelli scelti nel file *Input.dat*. Infatti, la deviazione standard della media di n variabili aleatorie normali è ridotta di un fattore \sqrt{n} rispetto alla deviazione standard della distribuzione dell'errore:

$$\sigma_{media} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$$

Eseguendo questa operazione l'errore può essere ridotto senza una perdita di informazione significativa, in linea di principio. Si deve tuttavia fare attenzione a non effettuare tale media se la radianza attorno ai canali prescelti varia rapidamente, **perché in questo caso potrebbe esserci una perdita d'informazione.** Si pensi ad esempio alle microfinestre della banda rotazionale del vapore acqueo.

Dopo che i dati di radianza sono stati modificati essi vengono finalmente convertiti in temperature di brillanza. Tali temperature di brillanza vengono salvate all'interno di un unico array bidimensionale chiamato *BT*. Le righe di tale array rappresentano gli spettri, mentre le colonne rappresentano le lunghezze d'onda.

B.4 La subroutine *Suddivisione*

Lo scopo di questa subroutine è suddividere l'array *BT* in 2 o 3 array più piccoli, a seconda del numero delle classi. Ciascun nuovo array conterrà soltanto temperature di brillanza relative a una determinata classe. **Questa suddivisione è effettuata unicamente per comodità.**

B.5 La subroutine *Ricerca delle Corrispondenze*

Questa subroutine è piuttosto articolata. Il suo scopo precipuo è quello di creare il file *Corrispondenze.dat*, che come già detto contiene molte informazioni riguardanti il ruolo svolto dagli spettri nel run. Tale subroutine viene chiamata due volte: la prima da ICICALL, poco dopo la chiamata alla subroutine *Suddivisione*, e la seconda volta da *Support Vector Machine*, dopo l'esecuzione della classificazione. Durante la prima chiamata, la funzione crea un array di stringhe (detto *StringaCorrispondenze*) e vi scrive numerose informazioni. **Prima di tutto, determina a quale classe appartiene ciascuno spettro.** In secundis, **determina se tale spettro ha fatto parte del *training set*, del *test set* o del *test set di ottimizzazione*** (il significato di quest'ultimo sarà spiegato più avanti).

Una volta terminata la classificazione, *Ricerca delle Corrispondenze* viene nuovamente chiamata da *Support Vector Machine* e nell'array *StringaCorrispondenze* viene scritto se un certo spettro è stato classificato correttamente in un certo ciclo del run. Dopodiché, il file *Corrispondenze.dat* viene scritto e salvato all'interno di una subdirectory specifica all'interno della directory principale del run.

Questo file è molto importante, in quanto permette all'utente di capire quali spettri sono più ostici da classificare o se il *training set* è stato soggetto a qualche tipo di bias.

B.6 La subroutine *Ottimizzazione*

La subroutine *Ottimizzazione* esegue un'operazione tanto delicata quanto importante. Come abbiamo visto nella sezione B.1, **il numero di feature totali indicate nel file Input.dat non necessariamente corrisponde al numero di feature che si desidera utilizzare nei cicli del run.** Questo perché l'utente potrebbe desiderare osservare **quali tra le feature indicate sono più significative per la classificazione.**

Tuttavia, **all'interno del file Input.dat si indica soltanto quanti canali tra quelli disponibili si desidera utilizzare nel run, e non quali.** Quest'ultima scelta viene effettuata automaticamente nella subroutine *Ottimizzazione*. Tale subroutine determina quale combinazione di *feature* contiene a priori la maggiore quantità di informazioni. Tale quantità è misurata come la somma degli autovalori della matrice di covarianza delle temperature di brillantezza relative a ciascuna combinazione di *feature*:

$$\begin{aligned} \text{cov}(BT) \mathbf{v}_i &= \lambda_i \mathbf{v}_i \\ I &= \sum_{i=1}^n \lambda_i \end{aligned} \tag{B.1}$$

dove I è il contenuto informativo a priori. In pratica, **la subroutine sceglie la combinazione di feature dove la variabilità dei dati è massima.** Questa operazione viene effettuata per ogni ciclo del run. **È evidente che questa operazione precede la classificazione, ed è assolutamente indipendente da essa.** Si tratta infatti di un'operazione basata su criteri arbitrari, atta esclusivamente all'individuazione a priori delle feature dove è custodita la massima variabilità nei dati.

Si evidenzia che i canali selezionati dalla subroutine dipendono esclusivamente dal dataset, **comprensivo di medie attorno al numero d'onda centrale ed errore sulla radianza:** a parità di dataset, la subroutine *Ottimizzazione* darà sempre gli stessi risultati.

```

232 %%% Determinazione dei valori ottimali di costo e gamma %%%
233
234 if n_classi==2
235     contatore2=0;
236     M=nan(ncosti,ngamma);
237     AccuratezzeOtter(nSVMtest,,:) = max(AccuratezzeClass20tt(nSVMtest,,:) + AccuratezzeClass10tt(nSVMtest,,:), minsum);
238     for aa=1:ncosti
239         for bb=1:ngamma
240             AccDiff=abs(AccuratezzeClass10tt(nSVMtest,aa,bb) - AccuratezzeClass20tt(nSVMtest,aa,bb));
241             if and(AccuratezzeOtter(nSVMtest,aa,bb) > minsum, AccDiff <= maxdiff)
242                 contatore2=contatore2+1;
243                 AccuratezzeOtttime=abs(AccuratezzeClass20tt(nSVMtest,aa,bb) - AccuratezzeClass10tt(nSVMtest,aa,bb));
244                 M(aa,bb)=AccuratezzeOtttime;
245             end
246         end
247     end
248     Min=min(min(M(:,:)));

```

Figura B.5: Parte di codice che rappresenta la selezione della coppia di parametri (C, γ) ottimali per un numero di classi pari a 2. In queste righe, si arriva alla selezione del valore minimo della matrice M.

B.7 La subroutine *Support Vector Machine*

Support Vector Machine è l'ultima subroutine computazionale di ICICLE, e la più importante. Al suo interno viene effettuata la classificazione degli spettri attraverso la libreria *libsvm* creata dall'Università di Taiwan. **Solo all'interno di questa subroutine si fa uso delle Support Vector Machine.**

La funzione è suddivisa in due tronconi. Il primo troncone effettua una procedura di ottimizzazione interna, detta *cross validation* mentre il secondo effettua la classificazione vera e propria.

B.7.1 Prima fase: cross validation

Descriviamo prima di tutto la cross validation. Come si è evidenziato nella sezione 4.3.2, per la classificazione sono stati utilizzati i kernel $k_{gauss}(x_i, x_j) = \exp(-\gamma(|x_i - x_j|)^2)$ e $k_{lin}(x_i, x_j) = x_i^\top x_j$. Come si può notare, il kernel k_{gauss} possiede un parametro libero, γ . **Se utilizziamo il kernel k_{gauss} , la classificazione ha accuratezze diverse al variare di γ , per cui è necessario scegliere un valore di γ ottimale prima di procedere con la classificazione vera e propria.**

È inoltre importante ricordare che il parametro C , il costo, è anch'esso un parametro libero al cui variare l'accuratezza muta. **È quindi necessario determinare anche il valore ottimale di questo parametro. Ciò è necessario anche qualora si utilizzi il kernel k_{lin} .**

Ricapitolando: utilizzando il kernel gaussiano, **è necessario ottimizzare le accuratezze al variare di due parametri, C e γ .** Utilizzando il kernel lineare, **è necessario ottimizzare le accuratezze al variare di un solo parametro, C .**

L'unico modo per effettuare questa operazione di ottimizzazione è sacrificare una parte del *training set*, trasformandolo in un *test set di ottimizzazione*, utile a valutare le accuratezze al variare dei parametri. **Questo sacrificio è necessario, perché per conoscere l'accuratezza modello per una certa coppia di parametri (C, γ) bisogna sapere a quale classe appartiene ciascuno degli elementi del test set di ottimizzazione.**

```

274
275     Mindex=find(M==Min);
276
277     costo_ind(nSVMtest)=mod(Mindex(1),ncosti);
278     gamma_ind(nSVMtest)=fix(Mindex(1)/ncosti)+1;
279
280     if costo_ind(nSVMtest)==0
281
282         costo_ind(nSVMtest)=ncosti; %% Caso particolare da definire
283
284     end
285
286     if gamma_ind(nSVMtest)==0
287
288         gamma_ind(nSVMtest)=ngamma; %% Caso particolare da definire
289
290     end
291
292     CostoFinale(nSVMtest)=2^((costo_ind(nSVMtest)+mincosto-1)/4);
293     GammaFinale(nSVMtest)=2^((gamma_ind(nSVMtest)+mingamma-1)/4);
294     disp(char(strcat('Valore di costo trovato:',{ ' '},num2str(CostoFinale(nSVMtest)))));
295     disp(char(strcat('Valore di gamma trovato:',{ ' '},num2str(GammaFinale(nSVMtest)))));
296

```

Figura B.6: Parte di codice che rappresenta la selezione della coppia di parametri (C, γ) ottimali. In queste righe, si arriva alla determinazione finale dei parametri.

B.7.2 Selezione dei valori C e γ ottimali

ICICLE non sceglie i valori di γ e di C ideali in base all'accuratezza assoluta della classificazione *tout court*. Sarebbe infatti superficiale scegliere la coppia (C, γ) relativa al valore di accuratezza assoluto più elevato. Riprendiamo l'esempio fatto nella Sezione 4, portandolo all'estremo. Supponiamo di voler effettuare la classificazione di 1000 spettri, di cui 950 sono relativi a cieli nuvolosi e 50 relativi a cieli sereni. **Classificando bene tutti i cieli nuvolosi e male tutti i cieli sereni otterremmo una classificazione accurata al 95%**. È chiaro che il nostro obiettivo è stato mancato completamente: nessun elemento appartenente alla classe dei cieli sereni è stato riconosciuto come tale! **La scelta dei parametri (C, γ) avviene quindi in base a un algoritmo più complesso**. Vediamolo meglio.

Premettiamo sottolineando che ICICLE può effettuare classificazioni in 2 o 3 classi. **A seconda del numero di classi, il codice effettua un algoritmo diverso per determinare la coppia (C, γ) ottimale**. Nel caso in cui si desideri effettuare una classificazione in 2 classi sono presenti più opzioni. Solo nel caso in cui il numero di classi sia 2, **ICICLE può seguire due percorsi a seconda delle impostazioni 14 e 14a nel file Input.dat**.

Supponiamo che tramite tali impostazioni si indichi che si vuole massimizzare la somma delle accuratezze. In questo caso, la procedura è la seguente. ICICLE somma il valore delle accuratezze delle due classi e salva tali valori in una nuova matrice, chiamata *Acsum*. Successivamente viene effettuato un ciclo su tutte le coppie di valori (C, γ) utilizzate nella fase di cross validation.

Se il valore di un elemento appartenente alla matrice *Acsum* supera il valore *minsum*, impostato all'interno del file Input.dat, e se allo stesso tempo la differenza tra le due accuratezze è inferiore a al valore *maxdiff* sempre impostato all'interno del file Input.dat, allora la somma delle accuratezze ACC_{SUM} viene salvata in un'altra matrice, *M*. Nel caso in cui si sia desiderato massimizzare il valore relativo a una certa classe, nella matrice *M* sarà salvata l'accuratezza relativa a quella classe, che sarà poi massimizzata.

Alla fine del ciclo viene determinato il valore massimo della matrice *M*. La coppia di valori

(C, γ) corrispondenti a tale valore minimo saranno considerati ottimali. La logica dietro a questa procedura è la seguente: si cerca di fare in modo che **la somma dei valori delle accuratezze sia elevata** e che **la differenza tra tali valori sia molto bassa**, in modo che **le accuratezze abbiano valori elevati e vicini tra di loro**.

Nel caso in cui il numero di classi sia pari a 2, **i valori di accuratezza calcolati tengono conto anche dei casi non classificati**, che possono essere stabiliti con un criterio più o meno severo regolabile tramite un'impostazione nel file *Input.dat*. **In pratica, se i casi si trovano sufficientemente vicini all'iperpiano ottimale, vengono considerati non classificati**.

Se il numero di classi è pari a 3, la procedura è simile, ma presenta alcune differenze. Come nel caso precedente, si ottiene prima di tutto la matrice *Accsum* sommando le tre matrici di accuratezza. Viene poi avviato un ciclo su tutte le coppie di valori (C, γ) .

Se il valore di *Accsum* relativo a una certa coppia (C, γ) supera il valore *minsum*, e se sono rispettate le seguenti condizioni:

$$|\text{ACC}_{\text{classe 3}} - \text{ACC}_{\text{classe 2}}| \leq \text{maxdiff} \quad (\text{B.2})$$

$$|\text{ACC}_{\text{classe 3}} - \text{ACC}_{\text{classe 1}}| \leq \text{maxdiff} \quad (\text{B.3})$$

allora nella matrice M sarà salvato il parametro ACC_{SUM} pari a:

$$\text{ACC}_{\text{SUM}} = \text{ACC}_{\text{classe 1}} + \text{ACC}_{\text{classe 2}} + \text{ACC}_{\text{classe 3}}$$

Tale parametro è massimo se i valori delle accuratezze sono tutti molto elevati, che è la condizione che si auspica. Si fa in modo che i valori delle accuratezze siano tutti molto vicini tra loro tramite le condizioni B.2 e B.3. In sostanza, l'obiettivo è identico al caso precedente: **si cerca di fare in modo che le accuratezze relative a tutte le classi siano elevate**.

B.7.3 Classificazione finale

Dopo questa fase prodromica, avviene la classificazione vera e propria con i parametri γ e C ideali su un *test set* che non ha nessun elemento in comune con il test set di ottimizzazione. I dati relativi al ciclo e al run vengono salvati nel file *Corrispondenze.dat* e nei grafici disegnati dalle subroutine *Plot Accuratezze* e *Scatter Plot*.

B.8 Le subroutine *Plot Accuratezze* e *Scatter Plot*

Le ultime due subroutine di ICICLE hanno l'unico compito di rappresentare graficamente l'esito del run. La subroutine *Plot Accuratezze* rappresenta le accuratezze del run in un grafico suddiviso in due pannelli. Nel pannello superiore, di default, vengono confrontate le accuratezze delle singole classi nel caso di inclusione e di esclusione del lontano infrarosso. Se l'utente lo desidera, può scegliere di confrontare due insiemi di canali arbitrari regolando le impostazioni nella prima sezione del file *Input.dat*. Il grafico viene salvato automaticamente nella *directory* del run nel formato *fig*, nativo di matlab. Questo formato è stato scelto per la sua versatilità e perché permette all'utente di personalizzare i grafici.

La subroutine *Scatter Plot* crea gli scatter plot relativi alle differenze di canali scelte dall'utente nel file *Input.dat*. Gli scatter plot sono suddivisi in due pannelli. Nel pannello superiore sono rappresentati gli spettri classificati in modo corretto, mentre nel pannello inferiore sono rappresentati gli spettri classificati in modo non corretto. Tutti gli scatter plot vengono salvati nella *directory* del run in formato *fig*. Tramite questi scatter plot l'utente potrà individuare quali sono le differenze di canali più significative nel run.

B.9 ICICALL: la funzione chiamante

ICICLE è diviso in una parte *operativa* e in una parte *organizzativa*. La parte *operativa* è racchiusa nelle subroutine, mentre la parte *organizzativa* è racchiusa nella funzione chiamante ICICALL. Per questo motivo, ICICALL è ampiamente commentata e può essere agevolmente modificata da chiunque voglia apportare delle migliorie al codice. **Un importante ruolo svolto da ICICLE è quello di effettuare una permutazione casuale delle righe delle matrici contenente le temperature di brillanza.** Tramite tale permutazione casuale si elimina qualsiasi tipo di bias nella scelta del training set e del test set di ottimizzazione. **Se l'utente lo richiede nel file *Input.dat*, la permutazione può non essere effettuata.**

Bibliografia

- [1] Commissione Europea, *Radiation Explorer in the Far Infrared*, 20 febbraio 1997.
- [2] Gianluca di Natale, Luca Palchetti, Giovanni Bianchini, Massimo del Guasta, *Simultaneous retrieval of water vapor, temperature, and cirrus clouds properties from measurements of far infrared spectral radiance over the Antarctic Plateau* 8 marzo 2017.
- [3] J.E. Bertie, H. J. Labbé, E. Whalley, *Absorptivity of Ice I in the Range 4000-30 cm⁻¹*, 13 dicembre 1968
- [4] Chang, Chih-Chung and Lin, Chih-Jen, *LIBSVM: A library for support vector machines*, ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology, 2011.
- [5] Carlo Arosio, *Antarctic cloud spectral emission from ground-based measurements, a focus on far infrared signatures*, Università di Bologna, Laurea Magistrale in Fisica del Sistema Terra, 2014.
- [6] Chih-Wei Hsu, Chih-Chung Chang, Chih-Jen Lin, *A Practical Guide to Support Vector Classification*, University of Taiwan, Department of Computer Sciences, 2016.
- [7] George W. Collins, *Stellar atmospheres*, 2003.
- [8] Olivero, J. J.; R. L. Longbothum *Empirical fits to the Voigt line width: A brief review*, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1977.
- [9] Dong Guoquan; Li Zhengzhi *The apparent emissivity of vegetation canopies*, Università di Hangzhou, 1992.
- [10] Patrick Chervet, Claire Lavigne, Antoine Roblin, Piero Bruscazioni, *Effects of aerosol scattering phase function formulation on point-spread-function calculations* Optical Society of America, 2002.
- [11] K. S. Seshandri e R. Norman Jones *The shapes and intensities of infrared absorption bands - A review* Consiglio nazionale delle ricerche del Canada, 1962.
- [12] H. O. Di Rocco e A. Cruzado, *The Voigt Profile as a Sum of a Gaussian and a Lorentzian Functions, when the Weight Coefficient Depends Only on the Widths Ratio*, Università nazionale del centro della Pcia di Buenos Aires,
- [13] Liang-Shih Fan, Chao Zhu, *Principles of Gas-Solid Flows*, Cambridge University Press, 1998.
- [14] M. W. Gallagher, *An overview of the microphysical structure of cirrus clouds observed during EMERALD-1* University of Manchester, 2004.
- [15] Sassen, K. and Dodd, G. C. *Haze particle nucleation simulations in cirrus clouds, and applications for numerical and lidar studies* Journal of the Atmospheric Sciences, 1989.

- [16] Wang, P.-H., Minnis, P., McCormick, M. P., Kent, G. S., and Skeens, K. M. *A 6-year climatology of cloud occurrence frequency from Stratospheric Aerosol and Gas Experiment II observations (1985–1990)* Journal of Geophysical Research, 1996.
- [17] E. J. Spreitzer, M. P. Marschalik, P. Spichtinger, *Subvisible cirrus clouds – a dynamical system approach* Institute for Atmospheric Physics, Johannes Gutenberg University Mainz, Germany, 2016.
- [18] Anja Costa, Jessica Meyer, Armin Afchine, Anna Luebke, Gebhard Günther, James R. Dorsey, Martin W. Gallagher, Andre Ehrlich, Manfred Wendisch, Darrel Baumgardner, Heike Wex e Martina Krämer *Classification of Arctic, Mid-Latitude and Tropical Clouds in the Mixed-Phase Temperature Regime* Journal of Atmospheric Chemistry and Physics, 2017.