Alma Mater Studiorum - Università di Bologna

SCUOLA DI SCIENZE Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari"

Laurea Magistrale in

Chimica Industriale

Class LM-71 - Scienze e Tecnologie della Chimica Industriale

Una nuova strategia per la misurazione di CO₂ in stratosfera

Tesi sperimentale

CANDIDATO

RELATORE

Giada Innocenti

Chiar.mo Prof. Massimo Carlotti

CO-RELATORE

Dott.ssa Bianca Maria Dinelli

Sessione II

Anno Accademico 2014-2015

Ad Alfano.

Sommario

Nella regione dell'infrarosso termico (TIR), le transizioni spettrali vibro-rotazionali della CO_2 sono storicamente sfruttate per ricavare la distribuzione di pressione (P) e temperatura (T) negli esperimenti spaziali. Oltre all'importanza intrinseca di questi due parametri, la loro conoscenza è necessaria nell'analisi dei dati per ricavare la distribuzione di qualsiasi molecola target dalle sue transizioni spettrali. Per ricavare la P e la T si assume di conoscere la distribuzione del VMR della CO_2 . L'accuratezza con cui si può ricavare la distribuzione della CO_2 insieme a quelle di P e T non è sufficiente. Inoltre, il VMR della CO_2 sta aumentando nel corso degli anni. Per questi motivi in questa tesi si propone una nuova strategia per misurare la distribuzione della CO_2 usando uno strumento a scansione del lembo posto su un satellite. L'idea è quella di sfruttare le transizioni rotazionali pure dell' O_2 nella regione del lontano infrarosso (FIR) per ricavare P e T. Dal momento che queste transizioni traggono origine da un momento di dipolo magnetico la loro forza di riga è molto bassa. Tuttavia, grazie alla grande abbondanza dell' O_2 in atmosfera e alla lunghezza dei cammini ottici, queste transizioni sono tra le più intense nello spettro atmosferico del FIR.

Il satellite considerato è posto su un'orbita quasi polare e lo strumento osserva l'emissione del lembo atmosferico in direzione opposta a quella di volo. Lo strumento ipotizzato è uno spettrometro a trasformata di Fourier con due porte di output ospitanti un detector per la regione del FIR, tra 80 cm⁻¹ e 180 cm⁻¹, e uno per quella del TIR, tra 685 cm⁻¹ e 980 cm⁻¹. La risoluzione spettrale è di 0.004 cm^{-1} . Mentre il NESR è di 5 nW. Il campionamento geometrico verticale dell'atmosfera è di 3 Km mentre quello orizzontale è di circa 100 Km. Usando la teoria dell'optimal estimation sono stati selezionati due set di intervalli spettrali da analizzare, uno per la regione del FIR e l'altro per la regione del TIR. Con queste ipotesi sono stati effettuati test di retrieval su osservati simulati per valutare le performance del sistema ipotizzato. Si è dimostrato che le transizioni della CO₂ nella regione del TIR non sono sufficienti per ricavare P e T insieme al proprio VMR con precisione soddisfacente e che l'uso dell'informazione derivante dal FIR fa aumentare la qualità del retrieval. Le performance dell'esperimento permettono di ricavare il VMR della CO₂ con una precisione di circa 1 ppm tra 10 Km e 60 Km con una risoluzione verticale di 3 Km e una orizzontale di circa 2.5° di latitudine. Si è quindi dimostrato la validità della strategia proposta in questo studio.

Abstract

In the Thermal InfraRed region (TIR), the spectral features generated by vibro-rotational transitions of CO_2 have been exploited to retrieve pressure (P) and temperature (T) distribution by space-borne experiments throughout history. Besides its intrinsic importance, the knowledge of P and T is necessary in the data analysis to retrieve the distribution of any target molecule from its spetral features. In order to retrieve P and T by exploiting CO_2 transitions it is assumed that its atmospheric distribution is known. Actually, the accuracy of the CO_2 distributions obtained by simultaneously retrieving it with P and T desn't match the requirements of atmospheric models. Moreover, it is known that the CO_2 VMR is increasing so that it is not properly correct to assume its VMR as constant with time. For these reasons a new strategy is proposed in this thesis to measure the CO_2 distribution using an orbiting passive limb sounder. The idea is to exploit the pure rotational transition of O_2 in the Far-InfraRed (FIR) region to retrieve P and T. Since these transitions originate from a magnetic dipole moment their line strength is very low. Nevertheless, due to the really high O_2 abundance and to the length of the limb sounding observation geometries optical paths, they are among the most intense features in the FIR atmospheric spectrum.

The hypothesized satellite is placed on a polar orbit and the instrument observes the atmospheric limb emission backward looking along the orbit track. The considered instrument is a Fourier-transform spectrometer with two output ports hosting a FIR detector, measuring between 80 cm⁻¹ and 180 cm⁻¹, and a TIR detector, measuring between 685 cm⁻¹ and 980 cm⁻¹, with a spectral resolution of 0.004 cm⁻¹. The NESR is 5 nW for both detectors. The instrument's geometrical vertical sampling step is 3 Km while the horizontal sampling step is about 100 Km.

For the analysis of the observations, two microwindows sets were chosen with the optimal estimation theory; one for the FIR region and the other one for the TIR. Several retrieval tests on simulated observations were conducted to evaluate the ideal instrument performance. It is demonstrated that CO_2 transitions in the TIR region aren't self-sufficient to retrieve P and T simultaneously with its VMR with a satisfactory precision and that the retrieval quality is increased by using the FIR information. The retrieval performance is good enough to retrieve CO_2 VMR with a precision of about 1 ppm between 10 Km and 60 Km with a vertical resolution of 3 Km and an horizontal resolution of about 2.5°. It was then demonstrated the validity of the proposed strategy.

Indice

Al	Abstract			i
1	Intr	oduzioi	16	1
2	Gli	antenat	i dello strumento proposto	7
	2.1	MIPA	S	7
	2.2	SAFI	E	10
	2.3	IRLS-	PREMIER	11
3	Lo s	trumer	ito ideale	13
4	Stra	i <mark>tegie d</mark> i	i retrieval	17
	4.1	Strate	gia di retrieval per la selezione di microwindows	17
		4.1.1	Criteri generali per accrescere le microwindows	17
		4.1.2	Implementazione del metodo per lo strumento in esame	19
	4.2	Strate	gia dell'analisi di osservazioni simulate	22
		4.2.1	Retrieval 1-D vs Retrieval 2-D	22
		4.2.2	Test di retrieval su osservati simulati	23
5	Rist	ıltati e o	discussione	29
	5.1	Datab	ase di microwindows	29
	5.2	Selezi	one di microwindows per l'analisi in base al loro information load	36
	5.3	Analis	i su osservati simulati	39
		5.3.1	Retrieval in cascata	39
		5.3.2	Multi-Target Retrieval (MTR)	45
		5.3.3	Risultati con Look-Up Tables (LUT)	50
		5.3.4	Risoluzione spaziale	54
6	Con	clusion	i e sviluppi futuri	57
A	Geo	metrie	di osservazione	61

B	Stru	menti matematici	65
	B .1	Forward model	65
	B .2	Retrieval model	67
	B.3	Optimal estimation	69
		B.3.1 Information gain	72
		B.3.2 Selezione di misure individuali usando il retrieval model	72
		B.3.3 Risoluzione spaziale	73
	B.4	Information Load	74
С	Info	rmazioni supplementari	77
	C .1	MWs selezionate considerando gli errori strumentali	77
	C .2	Information Load delle MWs ottimizzate per PTH	79
	C .3	Microwindows selezionate per l'analisi	82
	C .4	Retrieval in cascata su osservati simulati	87
	C.5	Multi-Target Retrieval (MTR) su osservati simulati	90
Bi	bliogı	rafia	93
Ri	Ringraziamenti 99		

Elenco delle figure

1.1	Andamento della concentrazione di CO_2 dal 1958 ad oggi [4]	1
1.2	Geometrie di osservazione	3
1.3	Simulazione dello spettro rotazionale puro dell'ossigeno molecolare per la	
	bassa stratosfera (quota di tangenza di circa 15 Km).	5
2.1	Esempi di linee di vista della geometria di scansione al lembo.	7
2.2	NESR ₀ di MIPAS al suolo e in volo. L'indice 0 denota l'assenza di radia-	0
		8
2.3	Regione spettrale totale di MIPAS, suddivizione in bande spettrali e princi- pali molecole identificabili nello spettro.	9
3.1	Confronto tra lo spettro con risoluzione pari a 0.025 cm^{-1} (in blu) e quello con risoluzione di 0.004 cm^{-1} (in nero) attorno ad una transizione dell'os-	
	sigeno	14
4.1	Rappresentazione dei due possibili metodi di crescita di una MW. Que- sta, che nel caso specifico contiene 6 misure, è rappresentata con i bordi più scuri [31]	18
4.2	Linee di vista di una sequenza di scansione al lembo. I punti rossi centrali indicano la quota di tangenza della sequenza definita dalle linee di vista, gli altri le quote di tangenza delle sequenze adicenti.	23
4.3	In 4.3(a) è mostrato in blu lo spettro simulato e in nero lo spettro osservato con la relativa differenza all'inizio del fit. In 4.3(b) sono mostrati gli stessi	0.5
	spettri ma dopo l'ultima iterazione del fit.	25
4.4	Profilo di H_2O per un caso generico. In blu e riportato il profilo ricavato dal-	
	la procedura di fit. Per ogni punto analizzato sono riportate le relative barre	
	di errore, i numeri vicini sono i valori di information gain per tale quota.	
	In azzurro e riportato il profilo iniziale con tratteggiate le relative incertez-	
	ze nel caso in cui durante il fit l'informazione ottenibile dagli osservati sia	~
	troppo bassa e si utilizzi come informazione <i>a-priori</i>	26

4.5	Passaggi fondamentali di una procedura di fit. In 4.5(a) è raffigurata la map- pa dei profili di riferimento in un'analisi di retrieval generati da un forward model. In 4.5(b) è mostrata la mappa dei profili iniziali (osservati) ottenuti perturbando in modo casuale i profili di riferimento. In 4.5(c) è rappresen- tata la mappa dei profili ottenuti come risultato della procedura di fit. In 4.5(d) sono rappresentate le differenze tra i valori ottenuti dal fit e quel- li di riferimento. In 4.5(e) e 4.5(f) sono mostrati i valori della risoluzione orizzontale e verticale ricavate dall'Averaging Kernel	27
5.1	MW 1 ottimizzata per il PTH. Le principali forme spettrali appartengono ad O_2 in verde e H ₂ O in blu. Le altre molecole (inquinanti) qui presenti hanno transizioni con intensità inferiori al NESR, linea blu tratteggiata	31
5.2	Sono riportati gli error budget relativi al target T, per la prima MW del database e per l'ultima. Si vede chiaramente come il retrieval sia gui- dato in entrambe principalmente dagli errori random (RND). Nell'ultima MW del retrieval si vede che gli errori relativi ad O ₃ e NO ₂ sono diminuiti sensibilmente rispetto alla prima MW.	32
5.3	MW 1 ottimizzata per la CO ₂ utilizzando l'informaziona <i>a-priori</i> derivante dalla 14esima MW per PTH. Le principali forme spettrali appartengono a CO_2 in verde e O ₃ in azzurro. Le altre molecole (inquinanti) qui presen- ti hanno transizioni con intensità inferiori al NESR, linea blu tratteggiata, eccezion fatta per una debole transizione dell'H ₂ O rappresentata in blu	34
5.4	Error budget per i database di MWs ottimizzati per CO ₂ nella zona del TIR. In 5.4(a) e 5.4(c) sono mostrati quelli relativi alla prima e all'ultima MW, rispettivamente, del database ottenuto utilizzando l'informazione <i>a-priori</i> climatologica. In 5.4(b) e 5.4(d) sono rappresentati, invece, gli error budget relativi alla prima e all'ultima MW del database ottenuto utilizzando l'informazione <i>a-priori</i> derivante dal retrieval di PTH nel FIR.	35
5.5	Mappa di informtion load rispetto alla T per il set di MWs scelte come matrice di occupazione per PTH	37
5.6	Mappa di informtion load rispetto alla CO_2 , per il set di MWs scelte come matrice di occupazione per la CO_2 .	38
5.7	Profilo di information load medio per la T ricavato dalla mappa mostrata in figura 5.5.	38
5.8	Profilo di information load medio per la CO_2 ricavato dalla mappa mostrata in figura 5.6.	39

5.9	Errori medi per ogni quota sul retrieval in cascata di PTH. In 5.9(a) sono	
	mostrati quelli sulla 1 mentre in 5.9(b) quelli sulla P ottenuti utilizzando	
	diverse griglie orizzontali di retrieval. In nero è rappresentato l'errore me-	
	dio sul retrieval con la griglia orizzontale con step di 1°, in rosso quello con	
	quella ogni 2° e in blu quello con quella ogni 3°	40
5.10	Errore medio sui target del retrieval in cascata. In 5.10(a) sono mostrati gli	
	errori medi sull'H ₂ O ottenuti usando diverse griglie orizzontali. In 5.10(b)	
	sono mostrati gli errori medi sui retrieval della CO ₂ effettuati con diverse	
	griglie usando i valori per T, P e H ₂ O ottenuti dal retrieval di PTH con la	
	griglia orizzontale a step di 1°.	41
5.11	Risoluzione orizzontale per la T (sopra) e per la CO_2 (sotto)	42
5.12	Test per valutare l'impatto di P, T e H ₂ O sul retrieval della CO ₂ . In nero	
	è riportato il risultato del caso in cui si usino i valori dei tre parametri otte-	
	nuti dal precedente retrieval. Il risultato ottenuto usando la T di riferimento	
	è il rosso, in verde quello con il valore di H ₂ O di riferimento mentre in blu	
	quello con la P di riferimento.	43
5.13	-	44
5.14	Errore medio sul retrieval in MTR per T in $5.14(a)$ e per CO ₂ in $5.14(b)$.	46
5.15	Confronto tra test di retrieval con target T. P. H_2O e CO_2 usando le MWs	
0.120	ottimizzate per PTH profilo pero, non utilizzando queste MWs, profilo ros-	
	so e considerando come target solo T $P \in CO_{2}$. Lrisultati sono riportati per	
	la T nel pannello (a) e per la CO_2 nel pannello (b)	47
5 16		19
5.10		40
5.17	Profilo dell'errore medio per la CO_2 (pannello (a)) e per la 1 (pannello (b)).	10
	Il retrieval in MTR e rappresentato in nero, quello in cascata in rosso.	49
5.18	Risultati del retrieval effettuato con l'uso delle LUT. In figura 5.18(a) si	
	vede l'errore assoluto per ogni punto mentre nella 5.18(b) si vedere il profilo	
	dell'errore medio sul retrieval.	52
5.19	Confronto tra l'errore medio sul retrieval effettuato con le LUT, in rosso, e	
	LBL, in nero.	53
5.20	Confronto tra il retrieval ottenuto con perturbazioni del 10% del profilo	
	iniziale della CO_2 , in rosso, e con l'1%, in nero.	53
5.21	Mappa degli errori su ogni profilo del retrieval in MTR della CO2 utiliz-	
	zando le LUT e una perturbazione dell'1% sul profilo di riferimento della	
	CO ₂	54
5.22	Rappresentazione di una riga dell'Averaging Kernel usata per valutare la	
	risoluzione orizzontale.	55

5.23	Risoluzione orizzontale per il retrieval della CO ₂	55
5.24	Risoluzione verticale per il retrieval della CO ₂ .	56
A.1	Geometria al lembo in cui sono evidenziate la quota di volo e le quote di tangenza [37].	62
B .1	Discretizzazione 2D dell'atmosfera. Uno spicchio, rappresentato in verde, è attraversato da tre diverse linee di vista.	74
C .1	Profili di $W\Omega$ medio per le MWs da 1 a 4 i cui estremi sono riportati nella tabella 5.1	79
C.2	Profili di $W\Omega$ medio per le MWs da 5 a 10 i cui estremi sono riportati nella tabella 5.1.	80
C .3	Profili di $W\Omega$ medio per le MWs da 11 a 14 i cui estremi sono riportati	
	nella tabella 5.1	81
C .4	MW 1 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza.	82
C.5	MW 2 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza	82
C .7	MW 7 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza	83
C. 8	MW 10 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza	83
C.6	MW 6 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza	83
C .9	MW 13 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza	84
C .10	MW 1 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota	84
C .11	MW 2 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota	84
C .12	MW 3 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota	85
C .13	MW 5 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota	85
C .14	MW 6 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota	85
C .15	MW 7 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota	86
C .16	MW 8 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota	86
C .17	MW 9 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota	86
C .18	MW 11 ottimizzata per CO ₂ a 30 Km di quota.	87
C .19	Mappe dei test sul retrieval di PTH per la T con diverse griglie orizzontali.	87
C .20	Mappe dei test sul retrieval di PTH per la P con diverse griglie orizzontali.	88
C.21	Mappe dei test sul retrieval di PTH per l'H ₂ O con diverse griglie orizzontali.	88
C.22	Mappe dei test sul retrieval della CO ₂ con diverse griglie orizzontali	89
C.23	Mappe dei prove effettuate per testare l'effetto dei target del retrieval di	
	PTH sul retrieval della CO ₂ .	89
C .24	Mappe dei test sul retrieval in MTR per la T con diverse griglie orizzontali.	90
C.25	Mappe dei test sul retrieval in MTR per la CO ₂ con diverse griglie orizzontali.	90

C.26 Mappe dell'errore assoluto per il retrieval effettuato usando solo le MWs	
ottimizzate per la CO_2 nella regione del TIR. In C.26(a) e C.26(d) i target	
del retrieval sono T, P, H_2O e CO_2 mentre in C.26(b) e C.26(c) i target sono	
$\mathbf{T}, \mathbf{P} \in \mathbf{CO}_2.$	91

Elenco delle tabelle

2.1	Riassunto delle principali caratteristiche strumentali di MIPAS per il modo	
	di osservazione nominale	9
2.2	Riassunto delle principali caratteristiche strumentali di SAFIRE-A nella sua	
	configurazione ottimizzata.	11
2.3	Riassunto delle principali caratteristiche strumentali di IRLS-PREMIER	
	nei suoi due possibili modi di osservazione.	12
3.1	Riassunto delle principali caratteristiche dello strumento ideale	15
5.1	Elenco delle MWs ottimizzate per il retrieval di PTH ordinate secondo la	
	figura di merito. La MW 12 ha un inf. gain maggiore delle due precedenti	
	ma è comunque posizionata dopo perché nell'a-priori utilizzata per la sua	
	selezione sono utilizzate anche le informazioni relative alle precedenti e una	
	fluttuazione di questo tipo è giustificabile.	30
5.2	Elenco delle MWs ottimizzate per il retrieval di CO ₂ , utilizzando come	
	informazione a-priori quella climatologica per selezionare la prima MW,	
	ordinate in funzione della figura di merito.	33
5.3	Elenco delle MWs ottimizzate per il retrieval di CO ₂ , utilizzando come in-	
	formazione a-priori quella dell'ultima MW del set ottimizzato per il PTH,	
	ordinate in funzione della figura di merito.	34
C .1	Elenco delle MWs ottimizzate per il retrieval di PTH considerando gli errori	
	strumentali	77
C .2	Database delle MWs ottimizzate per il retrieval di CO ₂ considerando gli	
	errori strumentali. A sinistra sono riportate le MWs selezionate utilizzando	
	un'informazione a-priori climatologica mentre a destra utilizzando quella	
	proveniente da una MWs del FIR	78

Capitolo 1

Introduzione

È pensiero comune che il riscaldamento globale sia stato causato principalmente dalle attività umane [1]. L'aumento delle temperature iniziato nel XX secolo e tutt'ora in corso è causato dall'incremento della concentrazione atmosferica dei così detti gas serra, dei quali uno dei più preoccupanti è la CO_2 .

Osservazioni a lungo termine a partire dal 1958 [2] mostrano che la concentrazione atmosferica di CO_2 è aumentata con una velocità di circa 1.9 ppm all'anno [3], principalmente a causa dell'utilizzo di combustibili fossili e deforestazioni. Nel maggio del 2014 la quantità mensile media di CO_2 , registrata a Mauna Loa, era di 401.78 ppm mentre nel medesimo mese del 2015 era pari a 403.94 ppm [4]. L'aumento del Volume Mixing Ratio (VMR) di CO_2 dal 1958 ad oggi è ben visibile in figura 1.1; in questa sono mostrate in rosso le misurazioni fatte a Mauna Loa, riportate in frazione molare in aria secca, mentre in nero sono



Figura 1.1: Andamento della concentrazione di CO₂ dal 1958 ad oggi [4].

rappresentati i dati stagionali medi.

Questo trend crescente provoca cambiamenti significativi nel quantitativo di radiazioni nel-

l'atmosfera, influenzando in modo significativo il nostro clima [5, 6]. È, inoltre, una delle cause di maggior incertezza per le previsioni climatologiche future. Per cercare di aumentare le nostre conoscenze sulle interazioni CO_2 - clima è necessario aumentare il numero di studi focalizzati sui meccanismi di produzione e sulle regioni di assorbimento della CO_2 . Infatti la nostra conoscenza sulle sorgenti di CO_2 e sul suo accumulo ha ancora gap significativi [7]. Una comprensione totale dei meccanismi e dell'ammontare di CO_2 globale potrà essere raggiunta solo quando gli studi dei processi regionali saranno confermati da osservazioni su scala globale [8]. Per questo negli ultimi 15 anni determinare la struttura spaziale e temporale dei flussi di carbonio è diventato uno dei maggiori obiettivi scientifici.

Nel così detto approccio 'inverso' il problema è studiato usando, come osservati in atmosfera dei gradienti di concentrazione che permettono di svincolarsi dai flussi superficiali. Tuttavia, è necessaria la conoscenza dei fenomeni di trasporto in atmosfera. Infatti il limite più significativo e profondo di questo approccio è proprio l'incertezza sui fenomeni di trasporto atmosferici. Inoltre, la carenza di informazioni sistematiche e continue (soprattutto nel dominio spaziale) sulla concentrazione di CO_2 porta spesso ad applicare condizioni al contorno più o meno discutibili.

Essendo la CO_2 un inerte in troposfera, tende a persistere per lungo tempo in questa regione atmosferica e ad avere un pronunciato ciclo stagionale che propaga dalla superficie. Le differenze tra il VMR superficiale e quello atmosferico sono determinate dai processi di trasporto dell'aria superficiale in troposfera, quali: avvezione, convezione e miscelazione a gorgo [9]. Dal momento che il trasporto dell'aria superficiale nella bassa stratosfera richiede diversi mesi, il VMR della CO_2 è basso in tale regione e il ciclo stagionale è diverso da quello troposferico [9, 10, 11]. Nonostante tutti i modelli di trasporto atmosferico siano in grado di riprodurre le caratteristiche generali della propagazione verticale e orizzontale della CO_2 è stato dimostrato che restano comunque dei problemi quali:

- una circolazione di Brewer-Dobson troppo forte che causa una sovrastima della concentrazione dei traccianti nella bassa stratosfera durante l'inverno e la primavera;
- un isolamento tropicale troppo forte che porta a una sottostima di tracciante nella bassa stratosfera durante l'inverno.

Per di più tutti i modelli provati soffrono in qualche modo a causa della diffusione e/o di un mescolamento troppo forte sopra la tropopausa. Inoltre i modelli mostrano un trasporto verticale troppo forte verso l'alta troposfera durante l'estate boreale [12].

Negli ultimi anni è diventato possibile misurare la colonna atmosferica (concentrazione integrata verticalmente) della CO_2 tramite osservazioni spaziali usando spettrometri, con geometria di osservazione al nadir, mostrata in figura 1.2, nella regione dell'infrarosso termico come:

• TIROS-N Operational Vertical Sounder (TOVS) [13],



Figura 1.2: Geometrie di osservazione.

- Atmospheric Infrared Sounder (AIRS) [14],
- Infrared Athmospheric Sounder Interferometer (IASI) [15],
- Tropospheric Emission Spectrometer (TES) [16];

oppure nel vicino infrarosso come:

- SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartographY (SCIAMACHY) [17]
- Greenhouse gases Observing SATellite (GOSAT) [18].

Nel 2014 è stato lanciato in orbita OCO-2, un satellite della NASA, adibito alla sola misurazione della colonna media di CO_2 [19].

I dati prodotti da questi satelliti sono tutti misurazioni di colonne piuttosto che di profili che sono essenziali per una comprensione profonda dei meccanismi di distribuzione della CO_2 . L'alta troposfera rappresenta approssimativamente il 20% della massa d'aria in colonna e il VMR della CO_2 in questa regione può essere diverso di 5 ppm o più di quello alla superficie [20, 21, 9].

Con strumenti a geometria al lembo (si veda figura 1.2)¹, in grado di osservare l'atmosfera lungo una linea di vista che non incontra la superficie terrestre, la risoluzione verticale dei profili misurati è dell'ordine di pochi chilometri ed è molto meglio di quello che si può fare con stumenti con geometria al nadir.

I profili di VMR della CO_2 sono stati ricavati globalmente in mesosfera (sopra i 70 Km, circa) e in bassa termosfera da misurazioni al lembo dello strumento Atmospheric Chemistry Experiment - Fourier Transform Spectrometer (ACE-FTS) dove le quote di tangenza sono determinate da informazioni geometriche [22, 23]. Questo metodo non è di grande qualità per misurare la CO_2 nella bassa stratosfera e in troposfera. D'altra parte gli spettrometri

¹Per ulteriori spiegazioni si veda l'appendice A

che misurano con la geometria al lembo nell'infrarosso termico come Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS) [24] e HIgh Resolution Dynamics Limb Sounder (HIRDLS) [25] usano la CO_2 per determinare le quote di tangenza e la temperatura sacrificando in questo modo la possibilità di misurare il profilo di VMR. Questo era anche il caso di ACE-FTS fino a che non ci sono stati studi per cercare di ricavare anche i profili di CO_2 .

Per valutare i profili della CO₂ ACE usa un retrieval con due step fondamentali: il primo è la stima dei parametri di pointing (quote di tangenza, profili di temperatura e pressione) e il secondo è la stima dei profili di concentrazione della CO₂. I parametri di pointing sono ricavati contemporaneamente analizzando idonee transizioni della CO2 con l'assunzione (discutibile, in certi casi), di una debole variazione della sua concentrazione atmosferica intorno a un valore climatologico. In pratica, sopra i 12 Km le quote di tangenza e i profili di pressione e temperatura sono ricavati con questa strategia mentre al di sotto di 12 Km la pressione e la temperatura sono presi da dati del Canadian Metereological Centre (CMC). Le quote di tangenza sono ricavate utilizzando opportune transizioni della CO2 intorno a 2600 cm^{-1} . Al di sopra dei 12 Km il problema principale che affligge le transizioni utilizzate è la dipendenza da queste dei parametri di pointing mentre al di sotto dei 12 Km è la forte dipendenza dalla variabilità della concentrazione di questo gas serra. Inoltre, per ricavare i profili di concentrazione di CO₂ dalle misure di ACE-FTS è stato necessario svincolare il retrieval dei parametri di pointing da qualunque conoscenza a priori di questo gas. Per lo scopo sono state sviluppate delle microwindows, piccoli intervalli spettrali, contenenti una o più transizioni del target e il continuo dell'azoto (utilizzato per svincolare i parametri di pointing dalla conoscenza a priori della CO₂). Questa strategia è utilizzabile fino a 25 Km perché al di sopra di questa quota l'intensità del continuo di N₂ diventa completamente trascurabile [26]. Lo strumento ACE-FTS è in grado di fornire profili verticali della CO₂ tra 5 e 25 Km con un errore totale sulla stima di CO₂ caratterizzato da un bias di \pm 1 ppm e una deviazione standard di circa 2 ppm dopo aver mediato più di 20 profili ricavati consistenti spazialmente e temporalmente [27].

In questa tesi si presenta una strategia alternativa per ricavare i profili di concentrazione atmosferica della CO_2 che non prevede l'uso delle sue forme spettrali per ricavare pressione (puntamento) e temperatura. Questi due parametri sono, infatti, ricavati utilizzando le transizioni rotazionali pure dell'ossigeno molecolare (VMR = 0.21) che si possono misurare nel lontano infrarosso (FIR) tra circa 80 cm⁻¹e 180 cm⁻¹, mentre i profili della CO₂ sono ricavati dalle sue transizioni vibro-rotazionali nella regione dell'infrarosso termico (TIR) utilizzando microwindows ottimizzate per lo scopo.

Essendo l' O_2 una molecola biatomica omonucleare non dovrebbe avere nessun tipo di transizione apprezzabile. Però, grazie al suo momento di quadrupolo riusciamo a rilevare delle transizioni che essendo transizioni di dipolo magnetico dovrebbero avere una forza di riga estremamente bassa. Tuttavia, grazie alla grande concentrazione di O_2 in atmosfera e ai lunghi cammini ottici delle geometrie di osservazione al lembo queste transizioni risultano tra le più intense nella regione spettrale del lontano infrarosso (FIR). Nella figura 1.3 è mostrato lo spettro rotazionale dell' O_2 simulato per la quota di tangenza di circa 15 km.

Riuscire ad utilizzare l'ossigeno molecolare per ricavare i parametri di pointing consente di svincolarsi completamente da informazioni sulla CO_2 e cosa ancora più importante, permette di utilizzare un gas il cui VMR è costante in atmosfera sia spazialmente che temporalmente. Fino a pochi anni fa, a causa delle difficoltà nel raffreddamento dei rivelatori nel FIR, utilizzare le transizioni dell' O_2 per ricavare pressione e temperatura era praticamente impensabile mentre con l'attuale tecnologia è diventato possibile.



Figura 1.3: Simulazione dello spettro rotazionale puro dell'ossigeno molecolare per la bassa stratosfera (quota di tangenza di circa 15 Km).

Capitolo 2

Gli antenati dello strumento proposto

In questo capitolo sono presentati tre strumenti, di cui due hanno effettuato misurazioni in atmosfera ed uno che si è fermato allo studio di fattibilità, che possono essere considerati come gli antenati dello strumento ideale ipotizzato per questo lavoro (capitolo 3). È possibile fare questa analogia perché le assunzioni fatte per lo strumento alla base di questa tesi nascono dall'esperienza scientifica maturata con questi tre precedenti strumenti.

2.1 MIPAS

MIPAS [24] è stato sviluppato dall'Agenzia Spaziale Europea (ESA) per lo studio della composizione atmosferica. Questo strumento ha operato a bordo del satellite ENVISAT (ENVironmental SATellite), il quale fu posto su un'orbita quasi polare il 1 Marzo 2002. Per MIPAS era stato previsto un tempo di vita pari a 5 anni, in realtà ha continuato a trasmettere dati fino all'8 Aprile 2012. Il 9 Maggio dello stesso anno in seguito all'interruzione del segnale con la terra ESA ha dichiarato conclusa la missione.

MIPAS è un interferometro di Michelson a trasformata di Fourier che osserva la radianza



Figura 2.1: Esempi di linee di vista della geometria di scansione al lembo.



Figura 2.2: NESR $_0$ di MIPAS al suolo e in volo. L'indice 0 denota l'assenza di radiazione dalla scena.

emessa dall'atmosfera con la geometria di osservazione al lembo¹. La rilevazione al lembo utilizza una linea di vista che penetra l'atmosfera fino a un'altezza minima, detta quota di tangenza, e poi, a causa della curvatura della superficie terrestre emerge di nuovo verso lo spazio, come si può vedere in figura 2.1 dove sono mostrate quattro linee di vista di altrettante osservazioni al lembo da satellite. Questo tipo di osservazione è selettivo per il segnale atmosferico emesso dallo strato della quota di tangenza, poiché è quello che contribuisce di più all'intensità del segnale misurato. Acquisire una sequenza al lembo con un set discreto di quote di tangenza, come fa MIPAS, consente di determinare i profili verticali dei parametri atmosferici.

MIPAS effettua osservazioni all'indietro rispetto alla direzione di volo iniziando a misurare dalla quota di tangenza più alta. Questo è necessario per compensare parzialmente gli effetti contemporanei di allontanamento delle quote di tangenza causato dalla scansione di una quota per volta (visibile in figura 2.1) e l'avvicinamento di queste dovuto al moto del satellite. Il tempo necessario per registrare uno spettro a risoluzione spettroscopica completa è di circa 4.5 s. Una sequenza di scansione al lembo nominale consiste di 17 spettri (geometrie di osservazione) misurati a quote di tangenza che vanno da 6 a 68 Km con una spaziatura di 3 Km alle basse quote che aumenta salendo (prima 5 Km e poi 8 Km), ed è acquisita in un tempo totale di 76 s. Durante ogni orbita sono acquisite 72 sequenze al lembo, distanziate tra loro di circa 500 Km. Ogni giorno sono ottenute 14 orbite per un totale di circa 1000 sequenze al lembo da cui si possono ricavare altrettanti profili dei target atmosferici (vedi appendice B, sezione B.1). Il NESR (Noise Equivalent Spectral Radiance) quantifica il livello di rumore degli spettri. Giace in un range compreso tra 3 e 50 nW/(cm² sr cm⁻¹) come si può vedere in figura 2.2, in funzione del range spettrale e del canale. Gli otto detectors di MIPAS coprono l'intervallo spettrale che va da 658 cm⁻¹ a 2410 cm⁻¹;

¹Ulteriori dettagli sono riportati in appendice A



Figura 2.3: Regione spettrale totale di MIPAS, suddivizione in bande spettrali e principali molecole identificabili nello spettro.

questo è diviso in cinque bande A, AB, B, C e D, riportate in figura 2.3. In questa sono mostrate anche le principali molecole target nella regione spettrale ispezionata da MIPAS. Ogni banda è coperta da uno o due detector specifici. Nella sua configurazione originale la massima differenza di cammino ottico dell'interferometro era di 20 cm che corrispondono ad una risoluzione spettrale non apodizzata di 0.025 cm⁻¹ (0.035 cm⁻¹ apodizzata). Questa è stata successivamente degradata (dopo il 2005) a 0.0625 cm⁻¹ (apodizzata) a causa di un problema con le guide degli specchi interferometrici. Il campo di vista (FOV) di MIPAS è di 3 Km al punto di tangenza.

MIPAS					
Proprietà	Unità				
Copertura spettrale	cm ⁻¹	658 - 2410			
Precisione radiometrica	%	1 - 3			
Campionamento verticale	Km	3			
Campionamento orizzontale	Km	500			
Range di scansione verticale	Km	6 - 68			
Risoluzione spettrale	cm ⁻¹	0.035 (0.0625 dal 2005)			
FOV	Km	3			

Nella tabella 2.1 sono riportate tutte le principali caratteristiche strumentali di MIPAS.

 Tabella 2.1: Riassunto delle principali caratteristiche strumentali di MIPAS per il modo di osservazione nominale.

2.2 SAFIRE

SAFIRE [28] è uno spettrometro ad alta risoluzione a trasformata di Fourier del tipo Martin-Puplett, ideato per stare a bordo di un aereo stratosferico. Lo spettrometro opera nella regione del FIR, da 10 cm⁻¹ a 250 cm⁻¹ misurando simultaneamente l'emissione atmosferica di due canali di rilevamento, con una larghezza di banda che va da 1 a diversi cm⁻¹. La risoluzione spettrale è di 0.004 cm⁻¹.

La versione dello strumento SAFIRE-A ha volato a bordo dell'aereo stratosferico M-55 Geophysica la cui massima quota di volo era 20 Km.

L'obiettivo scientifico è quello di misurare le specie della famiglia HO_x ed altre specie atmosferiche coinvolte nei fenomeni che portano alla diminuizione dell'O₃. I dati di questo strumento possono essere usati per ricavare informazioni circa i costituenti stratosferici minoritari che hanno transizioni nella regione del lontano infrarosso, quali O₂, O₃, H₂O₂, H₂O, OH, HO₂, HDO, HCl, HOCl, ClO, N₂O HNO₃, NO₂, HBr, HF, CO, HCN.

I profili di VMR per le molecole target con SAFIRE-A erano ottenuti nel range di altezza compreso tra la quota di volo e la tropopausa. Sopra la quota di volo la distribuzione dei costituenti atmosferici non poteva essere risolta, e quindi era possibile estrarre solamente ridotte informazioni riguardo al contenuto in colonna. Sotto la tropopausa, la limitata tra-sparenza dell'atmosfera terrestre, dovuta principalmente agli alti valori del VMR dell'H₂O, impedisce (in genere con questi tipi di strumenti) di estendere le osservazioni fino a quote più basse. Come conseguenza, le migliori performance dello strumento, in termini di co-pertura in altezza, erano raggiunte alle latitudini polari dove la tropopausa è collocata più in basso (fino ad 8 Km). Il campionamento verticale è stimato essere approssimativamente 1 o 2 Km mentre il campionamento orizzontale lungo la direzione di volo dipende dalla velocità dell'aereo (approssimativamente 650 Km/h a regime) e dalla velocità di scansione interferometrica selezionata. Per una scansione interferometrica acquisita in 30 s, il campionamento orizzontale di una sequenza di scansione al lembo completa (15 spettri) nella direzione di volo è minore di 100 Km (approssimativamente 1° di latitudine). Il FOV di SAFIRE-A è pari a 0.57°.

Il rapporto segnale-rumore (S/N) dello spettro è definito come il rapporto tra il segnale dell'emissione atmosferica maggiore (uguale a circa l'emissione di un corpo nero a 210 K) e il valore quadratico medio (RMS) del rumore misurato in zone senza segnale. Il valore di RMS del rumore è minore di 0.5 K e il S/N dello spettro osservato è maggiore di 500:1. Nella tabella 2.2 sono riportate tutte le principali caratteristiche strumentali di SAFIRE.

SAFIRE-A					
Proprietà Unità					
Copertura spettrale	cm ⁻¹	10 - 250			
Massima altezza di volo	Km	20			
Campionamento verticale	Km	1-2			
Campionamento orizzontale	Km	100			
Range di scansione verticale		tropopausa - quota di volo			
Risoluzione spettrale	cm ⁻¹	0.004			
S/N		500:1			
FOV	0	0.57			

 Tabella 2.2:
 Riassunto delle principali caratteristiche strumentali di SAFIRE-A nella sua configurazione ottimizzata.

2.3 IRLS-PREMIER

PREMIER [29], PRocess Exploration through Measurements of Infrared and Millimetrewave Emitted Radiation. È stato uno dei tre candidati per la settima missione Earth Explorer di ESA. La missione si propone di fare misurazioni dettagliate nella medio-alta troposfera e nella bassa troposfera per quantificare la composizione atmosferica globale in questo range di altezze particolarmente importante per il clima. PREMIER consiste di uno spettrometro infrarosso con geometria al lembo (IRLS) affiancato da un rilevatore al lembo nella regione delle microonde (MWLS) che consente di effettuare le osservazioni anche in presenza di cirri, dando informazioni complementari a quelle fornite dallo strumento IRLS sui gas costituenti l'atmosfera.

Lo strumento PREMIER-IRLS impiega uno spettrometro a trasformata di Fourier con due array detector bidimensionali (2-D) per misurare l'emissione atmosferica nelle due seguenti regioni spettrali: da 771 cm⁻¹ a 980 cm⁻¹ (banda A) e da 1100 cm⁻¹ a 1650 cm⁻¹ (banda B). Ogni array detector 2-D è costituito da circa 100×100 pixel e avrebbe fornito circa 10000 scansioni al lembo in un range di altezza compreso tra 5 e 55 Km, con un campo orizzontale di osservazione di 320 Km simultaneamente. Questo strumento avrebbe raggiunto una risoluzione verticale migliore di 900 m nella parte bassa dell'atmosfera campionando con passi di circa 700 m.

La radianza di una singola misura è originata principalmente da un volume di aria di circa

500 Km di estensione lungo la linea di vista. L'estensione verticale è determinata principalmente dalla speciale geometria di vista delle osservazioni al lembo e il campo di vista verticale (FOV), è, al punto di tangenza, di circa 750 m.

IRLS sarebbe stato in grado di fornire due modi di misura complementari con diverse performance spettrali, spaziali e radiometriche. I due modi operazionali sarebbero stati uno dedicato alla chimica dell'atmosfera (CM - Chemistry Mode) e uno dedicato alla dinamica dell'atmosfera (DM - Dynamics Mode).

Nel CM lo strumento doveva operare con una maggiore risoluzione spettrale (0.27 cm⁻¹), ottimizzata per osservare i gas atmosferici da monitorare. Nel DM, invece, avrebbe operato con una maggiore risoluzione spaziale (a discapito di quella spettrale che in questa modalità è rilassata a 1.73 cm⁻¹), ottimizzata per risolvere le strutture atmosferiche. La massima differenza di cammino ottico sarebbe stata circa 2.5 cm in CM e circa 0.4 cm in DM. La copertura verticale di entrambi i modi sarebbe stata di 48 Km con il limite inferiore che sarebbe aumentato di quota andando dai poli (4 Km) verso l'equatore (8 Km) per tenere conto della variazione latitudinale di altezza della tropopausa. Il campionamento verticale sarebbe stato diverso a seconda della modalità di lavoro selezionata.

Lo sviluppo di questo strumento si è fermato dopo lo studio di fattibilità a causa degli elevati costi di realizzazione. Per questo non è stato il candidato scelto da ESA per una missione su satellite.

Nella tabella 2.3 sono riportate tutte le principali caratteristiche strumentali di IRLS nei suoi due modi di osservazione.

IRLS-PREMIER					
Parametro	Unità	DM	СМ		
Copertura verticale	Km	48 (4-52 @ poli, 8-56 @ tropici)			
Copertura orizzontale	Km	320			
Campionamento verticale	Km	0.7	2		
Risoluzione spettrale	cm^{-1}	1.73	0.27		
Copertura spettrale	cm^{-1}	710 - 1650			
FOV	m	750			

 Tabella 2.3: Riassunto delle principali caratteristiche strumentali di IRLS-PREMIER nei suoi due possibili modi di osservazione.

Capitolo 3

Lo strumento ideale

Lo strumento ipotizzato per questo studio di fattibilità è un interferometro a trasformata di Fourier operante con la geometria di scansione al lembo che misura in direzione opposta a quella di volo del satellite. Quest'ultimo è un satellite ad orbita bassa (quota di circa 700 Km) che si muove su un'orbita quasi polare (inclinata di 9°) passante per l'equatore sempre al solito orario, ossia alle 10.00 e alle 22.00. Lo strumento in questa fase dello studio è privo di qualunque errore sistematico (per questo definito ideale)¹. L'interferometro è dotato di due porte di output destinate ad ospitare due rivelatori adibiti alle due diverse zone spettrali d'indagine, uno per l'infrarosso termico (TIR), da 685 a 980 cm⁻¹e l'altro per la zona del lontano infrarosso (FIR), da 80 a 180 cm⁻¹. Il tipo di detector scelto è un array vertica-le (ispirato al tipo di rivelatore utilizzato per lo strumento IRLS nello studio PREMIER, sezione 2.3 capitolo 2) che consente di misurare tutte le geometrie di una sequenza di limb-scanning con un'unica scansione dello specchio mobile dell'interferometro, eliminando in questo modo lo spostamento delle quote di tangenza che avviene misurando una geometria per volta (figura 2.1).

La strategia scelta, di misure al lembo, consente rispetto a quella al nadir (ampiamente usata negli esperimenti spaziali) di ricavare i profili dei target atmosferici con una maggiore accuratezza perché permette di operare con una più alta risoluzione verticale. Le due strategie e le relative differenze sono trattate in dettaglio nell'appendice A.

Il tempo necessario per registrare uno spettro a risoluzione spettroscopica completa è di circa 15 s. Una sequenza di scansione al lembo consiste di 17 spettri misurati a quote di tangenza che vanno da 6 a 68 Km con una spaziatura di 3 Km alle basse quote che aumenta salendo (prima 5 Km e poi 8 Km). Durante ogni orbita sono acquisite circa 400 sequenze al lembo, distanziate tra loro di circa 100 Km. In un giorno sono ottenute 14 orbite per un totale di circa 5600 sequenze al lembo da cui si possono ricavare altrettanti profili dei target

¹È impossibile definire gli errori sistematici di uno strumento di cui ancora non si conoscono tutte le caratteristiche tecnico-meccanicistiche



Figura 3.1: Confronto tra lo spettro con risoluzione pari a 0.025 cm⁻¹ (in blu) e quello con risoluzione di 0.004 cm⁻¹ (in nero) attorno ad una transizione dell'ossigeno.

atmosferici.

Il range di copertura verticale, così come le geometrie di osservazione, si ispira principalmente a MIPAS (sezione 2.1 nel capitolo 2) del quale è adottato anche il FOV di 3 Km. Questo strumento ideale, infatti, voleva essere inizialmente una sua evoluzione di modo da poter sfruttare tutte le conoscenze strumentali già note. Tuttavia, all'inizio dello studio il problema da risolvere è stato quello relativo alla selezione "veloce" e con un metodo non propriamente oggettivo delle microwindows² (MWs) per verificare che le transizioni dell'ossigeno molecolare rispondessero in modo significativo alle variazioni di temperatura.

Lo spettro atmosferico nella regione del FIR è quasi esclusivamente quello rotazionale puro e le principali molecole che lo generano sono O_2 , H_2O e O_3 . Le transizioni rotazionali di questi tre gas sono molto vicine (e spesso non distinguibili) tra loro e con la risoluzione inizialmente scelta, ossia la full resolution di MIPAS di 0.025 cm⁻¹, non era possibile isolare intervalli spettrali contenenti solo (o almeno principalmente) transizioni di O_2 . La differenza tra le due risoluzioni può essere apprezzata nella figura 3.1 in cui è mostrato in blu lo spettro con la risoluzione di MIPAS e in rosso quello con la risoluzione più alta. Il criterio di scelta iniziale non era quello sistematico che verrà affrontato nella sezione 4.1 del capitolo 4 ma era un criterio soggettivo in funzione delle MWs che "a vista" sembravano le più promettenti. Per questo motivo si è deciso di adoperare una risoluzione molto più alta che consentisse di separare visivamente le transizioni senza problemi. La risoluzione scelta per questo lavoro è quella di SAFIRE di 0.004 cm⁻¹.

Il NESR considerato, di 5 nW, è stato scalato dal NESR di IRLS (vedi capitolo 2) ed è stata

²Piccoli intervalli spettrali contenenti una o più transizioni della molecola target.

verificata la sua compatibilità con le caratteristiche dei moderni rivelatori per il FIR che sono un'evoluzione di quelli utilizzati su SAFIRE.

In questa tesi il problema sarà affrontato utilizzando la risoluzione spettrale di 0.004 cm^{-1} ma lo stesso tipo di analisi, spiegata nei capitoli successivi, potrà essere utilizzata per valutare i risultati ottenibili con una qualunque altra risoluzione. Nella tabella 3.1 sono riportate in breve tutte le caratteristiche strumentali precedentemente esposte.

Strumento ideale			
Proprietà	Unità		
Copertura spettrale FIR	cm ⁻¹	80 - 180	
Copertura spettrale TIR	cm ⁻¹	685 - 980	
Campionamento verticale	Km	3	
Campionamento orizzontale	Km	100	
Range di scansione verticale	Km	6 - 68	
Risoluzione spettrale	cm ⁻¹	0.004	
NESR	nW	5	
FOV	Km	3	

 Tabella 3.1: Riassunto delle principali caratteristiche dello strumento ideale.
Capitolo 4

Strategie di retrieval

Per verificare se è possibile ricavare il profilo di CO_2 dopo aver trovato quelli di pressione (P) e temperatura (T) è necessario identificare un set di MWs da sottoporre ad un'analisi di retrieval su osservati simulati in modo da valutare la bontà dell'informazione contenuta da queste.

In questo capitolo saranno, quindi, esposte le strategie di retrieval e le assunzioni utilizzate per la selezione di MWs, prima, e per l'analisi dei dati simulati, poi. Saranno, inoltre, messe in luce le differenze e le similitudini tra i due metodi di retrieval sfruttati. Il che equivale all'affrontare da un punto di vista fisico-applicativo i concetti matematici riportati nell'appendice B.

4.1 Strategia di retrieval per la selezione di microwindows

Nella prima parte di questa sezione saranno esposti, in breve, i criteri generali per selezionare e accrescere le MWs. Nella parte successiva sarà spiegato il modus operandi per la selezione e la crescita di MWs utilizzato nel caso studio alla base di questa tesi¹.

4.1.1 Criteri generali per accrescere le microwindows

Il dominio di misure disponibili per uno strumento a scansione del lembo può essere considerato come una griglia bidimensionale, in cui ogni misura è definita dalla sua posizione lungo gli assi relativi uno ai punti spettrali e l'altro alle quote di tangenza.

Piuttosto che utilizzare una misura isolata, l'uso di un insieme di misure adiacenti (MWs) di solito consente di aumentare l'efficenza computazionale del forward model² (vedi sezione B.1 dell'appendice B). Per esempio, l'uso dello stesso punto sulla griglia spettrale per

¹Le competenze relative a questa sezione sono state acquisite presso il dipartimento AOPP (Atmospheric Oceanic Planetary Physics) dell'università di Oxford.

²In questa fase dell'analisi il forward model utilizzato è stato il Reference Forward Model (RFM) [30].

quote di tangenza adiacenti consente di ridurre il numero di elementi indipendenti richiesti per simulare l'atmosfera ai livelli più alti e rappresentare la convoluzione della linea di vista per ogni misura. Inoltre usare punti adiacenti sulla griglia spettrale a qualunque quota di tangenza consente una riduzione nel numero medio di linee di vista da modellare per rappresentare la forma di riga.



Figura 4.1: Rappresentazione dei due possibili metodi di crescita di una MW. Questa, che nel caso specifico contiene 6 misure, è rappresentata con i bordi più scuri [31].

Il metodo per la selezione di misure singole (sezione B.3.2 appendice B) può essere esteso alla selezione di coerenti sottoinsiemi di misurazioni. A seconda del tipo di figura di merito (sezione B.3.1 appendice B) adottata si può favorire o meno la crescita delle MWs.

Le MWs possono crescere sia punto per punto che *di taglio*, come mostrato nella figura 4.1. Accrescere una MW di taglio significa che tutti i punti lungo una "linea di confine" della MW saranno testati insieme

e se questi fanno aumentare la figura di merito la MW si espanderà in tale direzione. Diversamente accrescere una MW punto per punto significa che tutti i punti che risiedono su una linea di contorno della MW saranno testati individualmente, e saranno inglobati solamente i punti con un impatto positivo sulla figura di merito. Questo approccio può lasciare punti mascherati dentro la MW, questi sono rappresentati dai rettangoli neri all'interno della MW mostrata a destra in figura 4.1, che corrispondono a misurazioni che saranno escluse dalla selezione.

L'apodizzazione introduce correlazioni nel rumore casuale tra punti spettrali adiacenti. Queste sono ignorate quando si considerano misure isolate ma se si accrescono MWs, devono essere incorporate nel momento in cui si aggiorna il vettore (equazioni B.3.13 e B.3.14 nella sezione B.2 dell'appendice B) per aggiungere il sottoinsieme y di misurazioni affette da queste correlazioni all'interno della MW. Queste correlazioni sono poi espresse negli elementi fuori diagonale dell'associata matrice varianza-covarianza S_y relativa agli errori casuali.

La crescita della MW si ferma quando l'inclusione di qualunque ulteriore punto risulta in una figura di merito inferiore oppure quando è stata raggiunta una dimensione (quantitativo di punti) massima [31].

4.1.2 Implementazione del metodo per lo strumento in esame.

Lo strumento ideale è stato ampiamente descritto nel capitolo 3, e la tabella riassuntiva è riportata a pagina 15. Per la selezione delle MWs si sono utilizzati i seguenti parametri: risoluzione spettroscopica di 0.004 cm⁻¹, 17 quote di tangenza, ampiezza degli intervalli spettrali da indagare per il set di MWs da selezionare nella zona del FIR 100 cm⁻¹ (25000 punti spettrali) mentre per la zona del TIR è di 295 cm⁻¹ (73750 punti spettrali). Si è tenuto conto anche del NESR di 5 nW, il cui reciproco al quadrato sarà il valore di tutti gli elementi della diagonale della matrice varianza covarianza relativa agli osservati S_y^{-1} (si veda equazione B.2.5).

Il dominio delle misure è quindi pari a $17 \times 25000 = 425000$ punti per le MWs relative a PTH mentre per quelle relative alla CO₂ è $17 \times 73750 = 1253750$ punti.

In questa ricerca le MWs sono state fatte crescere con il metodo di taglio e l'algoritmo utilizzato basato sulla teoria dell'optimal estimation ha bisogno di avere come input un set (x punti spettrali e y quote di tangenza) rettangolare che può essere ricavato in qualunque modo. Si può quindi riprocessare anche un set ipotetico di MWs, ottenuto con un algoritmo adibito a selezionare dei "rettangoli" (MWs ipotetiche) che contengano ad esempio 50 punti spettrali \times n quote di tangenza (con n = 1 ... 17) oppure si possono isolare questi domini selezionandoli "a vista". È necessario che le MWs ipotetiche selezionate occupino un numero di punti spettrali superiori a 35 per la zona del FIR mentre per il TIR deve essere superiore a 43. Questo perché le transizioni dell'ossigeno molecolare da cui si vuole ricavare P e T occupano circa 35 punti spettrali mentre quella della CO₂ (della quale si vuole ricavare il profilo) occupano circa 43 punti spettrali. Scegliendo domini spettrali inferiori si rischia che le MWs non si espandano a sufficienza poiché il problema maggiore della crescita di MWs di taglio è che si valutano soltanto i confini ± 1 . Se questi portano a una diminuizione di information gain (si veda equazione B.3.18) non vengono scelti arrestando la crescita della MW. D'altronde non è certo che i confini ± 2 portino allo stesso risultato. Tuttavia, considerare tutti i possibili casi è troppo dispendioso in termini di tempo di calcolo. Inoltre l'obiettivo di questa tesi non è quello di trovare un metodo più robusto per la selezione e l'accrescimento di MWs.

Le MWs ipotizzate con vari metodi sono state riprocessate con l'algoritmo basato sull'optimal estimation per espanderle, se possibile, sia nel dominio delle quote di tangenza che in quello dei punti spettrali. Il massimo numero di punti spettrali da cui può essere costituita una MWs è stato posto a 125 (ossia 0.5 cm^{-1}). Le MWs sono ordinate dall'algoritmo di selezione in ordine di information gain decrescente.

Con il metodo precedentemente descritto sono stati selezionati due diversi set di MWs, uno ottimizzato per P, T e H_2O (PTH), nel FIR, mentre l'altro ottimizzato per la CO_2 , nel TIR. Per entrambe le selezioni è stato utilizzato il medesimo vettore x costituito da 5 elementi

rappresentati i profili di T, P, di VMR per $H_2O e CO_2 e di continuo atmosferico. Nella zona del FIR, dove non sono presenti transizioni della <math>CO_2$, la presenza di questa nel vettore di stato è assolutamente irrilevante. Per quanto riguarda la selezione per la CO_2 si è deciso di continuare ad ottenere informazioni su P, T e H_2O anche in questa regione poiché abbiamo un'informazione *a-priori* ben costruita dal FIR. Si assume che per ogni MW il continuo sia indipendente perchè si considera di non avere alcuna conoscenza riguardo al suo andamento. Ad esempio in una MW potrebbe essere semplicemente una linea piatta mentre in un'altra potrebbe essere una linea inclinata. Per questo motivo le informazioni relative al continuo non dovranno essere propagate nelle successive MWs. Per le MWs ottimizzate per PTH nel calcolo dell'information gain sono inclusi solamente i contributi di P, T e H_2O mentre è considerato solo quello della CO_2 nelle MWs ottimizzate per ricavare i profili di questa molecola.

Non è stato utilizzato nessun vincolo climatologico specifico ma sono state assunte incertezze *a-priori* molto grandi:

- di 10 K per T,
- 10% per P e VMR della CO₂,
- 100% per il continuo e il VMR dell'H₂O.

Per ogni punto lungo l'asse spettrale ci sono potenzialmente 289 elementi della matrice Jacobiana, K, per ogni parametro di retrieval da considerare³, corrispondenti a 17 quote di tangenza × 17 livelli di profili. Tutti gli elementi di matrice k_{ll} sono stati precalcolati mentre per gli elementi di matrice k_{jl} sono stati precalcolati solamente quelli da j = l - 1 fino a *j* uguale al 17esimo livello. Questo perché si è considerato che solamente il livello l - 1sia necessario per modellare correttamente il trasferimento radiativo tra i livelli sottostanti. I livelli sovrastanti sono considerati tutti nella modellazione perché tutti sono attraversati dalla linea di vista come si può vedere seguendo una qualunque delle quattro linee di vista riportate nella figura 2.1 del capitolo 2.

L'apodizzazione, nel nostro caso di *Norton-Beer strong*, introduce correlazioni spettrali che sono considerate negli elementi subito fuori diagonale di \mathbf{S}_{u}^{rnd} .

Gli errori spettrali ∂y^i sono precalcolati sulla base della perturbazione di profili standard a media latitudine assumendo le seguenti fonti di errore: la variabilità di 4 specie contaminati (O₃, CH₄, NO e NO₂) per le MWs ottimizzate per PTH mentre per quelle per la CO₂ è considerata la variabilità di 11 contaminanti (O₃, CFC-11, CFC-12, CH₄, N₂O, HNO₃, ClONO₂, NO₂ e N₂O₅). Per selezionare le MWs si usano i profili medi climatologici disponibili per le specie contaminanti. L'errore associato a questa assunzione è causato dalla variabilità atmosferica delle medie climatologiche, così l'errore relativo ad ogni specie è calcolato dalla

³Quindi 289 elementi per P, 289 per T, 289 per H₂O, 289 per CO₂ (considerati solo nella regione IR) e 289 per il continuo.

differenza in radianza tra un'atmosfera nominale e un'atmosfera con il profilo della specie contaminante, considerata, perturbato dalla sua variabilità stimata di 1σ .

Nel caso del retrieval della CO_2 non si considerano incertezze relative ai valori di P e T ottenuti nella precedente analisi poiché si è deciso di mantenere sia P che T nel vettore di stato e continuare a migliorare la loro definizione. In entrambi i retrieval si è considerato tra gli errori sistematici quello relativo al non equilibrio termodinamico (NLTE). Questo errore potrebbe essere trascurato senza problemi di nessuna sorta per il FIR mentre al contrario risulta fondamentale per la selezione delle MWs ottimizzate per la CO_2 nell'IR soprattutto se si intende usarle per misurazioni sia in diurne che in notturne.

Oltre ai set di MWs per uno strumento ideale sono stati ipotizzati dei set per uno strumento reale. Per fare questo si sono aggiunti gli errori sistematici strumentali relativi all'allargamento della riga spettrale, allo shift della transizione spettrale (errore di calibrazione) e quello relativo alla possibile sovrastima della radianza misurata (gain error). Per questi errori si sono ipotizzati i seguenti valori:

- gain error = 0.1%
- calibration error = 0.5%
- calibration accuracy = 0.0001%

I set per lo strumento reale, tuttavia, sono assolutamente ipotetici e la loro bontà non è stata valutata con le analisi di retrieval esposte nella sezione successiva.

4.2 Strategia dell'analisi di osservazioni simulate

Nella prima parte di questa sezione è descritta la differenza tra un analisi di retrieval 1-D (monodimensionale), utilizzata per la selezione delle MWs, e una 2-D (bidimensionale), usata per l'analisi di queste. Successivamente è spiegato cosa significa fare un fit su osservati simulati, riportando inoltre le assunzioni fatte per il caso in esame.

4.2.1 Retrieval 1-D vs Retrieval 2-D

Nella selezione delle MWs l'atmosfera è stata studiata con un retrieval 1-D assumendo l'omogeneità orizzontale di questa.

Questa assunzione insieme al retrieval sequenziale dei target può condizionare significativamente l'error budget dell'analisi. Infatti, nel caso in cui ci sia una forte variabilità orizzontale lungo la linea di vista strumentale e ogni volta che l'atmosfera è molto diversa dall'informazione *a-priori* climatologica con questo tipo di retrieval si possono ottenere risultati poco accurati. Inoltre, un algoritmo 1-D opera su una scansione al lembo individuale, perciò la risoluzione orizzontale dei prodotti ricavati è implicitamente condizionata dalla separazione orizzontale tra scansioni successive.

In una misura al lembo il segnale che raggiunge lo spettrometro è determinato dai processi di trasferimento radiativo lungo l'intera linea di vista. Da questo segue che ogni osservazione contiene informazioni rispetto a tutte le posizioni che sono attraversate dalla linea di vista. In ogni caso, le analisi di inversione che tentano di derivare i parametri atmosferici alle diverse posizioni delle linee di vista sono problemi mal posti, in cui si ha un numero di incognite maggiore di quello degli osservati, il che impedisce il retrieval delle informazioni desiderate. L'approssimazione di primo ordine che è di solito utilizzata è di considerare che il contenuto di informazione provenga interamente dalla quota di tangenza. Questo è il metodo chiamato a "onion peeling" in cui l'atmosfera osservata è assunta essere orizzontalmente omogenea e si analizzano sequenzialmente le osservazioni al lembo per ricavare la quantità incognita all'altezza corrispondente alla quota di tangenza. In un'approssimazione di secondo ordine l'assunzione dell'atmosfera orizzontalmente omogenea è mantenuta, ma ogni osservazione al lembo contribuisce a determinare le incognite a diverse altezze tra quelle attraversate dalla linea di vista. Questo è il metodo (1-D) del global-fit [32] in cui il problema di retrieval può essere risolto perché tutte le osservazioni di una sequenza di scansione al lembo sono utilizzate in un'analisi simultanea. In un global fit le informazioni circa una data altezza sono ricavate da tutte le linee di vista che attraversano tale altezza. Nell'approssimazione di terzo ordine l'assunzione dell'omogeneità orizzontale è abbandonata. Questo significa che ogni osservazione al lembo deve contribuire alla determinazione di incognite a un numero di posizioni tra quelle attraversate dalla sua linea di vista. In que-



Figura 4.2: Linee di vista di una sequenza di scansione al lembo. I punti rossi centrali indicano la quota di tangenza della sequenza definita dalle linee di vista, gli altri le quote di tangenza delle sequenze adicenti.

sto caso l'informazione circa una data posizione non può essere ricavata dalle osservazioni di una stessa sequenza di scansione al lembo (come in un global fit) perché (in conseguenza del moto del satellite e della variabilità orizzontale dell'atmosfera) non ci sono posizioni comuni attraversate dalle linee di vista di una stessa sequenza.

Nell'analisi dei dati da un esperimento con scansione al lembo, l'assunzione dell'omogeneità orizzontale dell'atmosfera può, quindi, essere evitata se ogni osservazione al lembo contribuisce a determinare la quantità incognita ad un numero di diverse "posizioni" tra quelle che rientrano nella sua linea di vista, si veda figura 4.2. Nel caso di uno strumento che osserva lungo la traccia dell'orbita, l'assunzione dell'omogeità orizzontale può essere evitata sfruttando il fatto che le misure con scansione al lembo sono ripetute continuamente lungo il piano dell'orbita. Questa ripetizione rende possibile guadagnare informazioni riguardanti una data regione atmosferica da tutte le linee di vista che la attraversano indipendentemente dalla sequenza a cui esse appartengono. Dal momento che il loop di sequenze vicine incrociate finisce quando si raggiunge di nuovo la sequenza di partenza alla fine dell'orbita, in un'analisi di retrieval il pieno guadagno di informazione può essere ottenuto unendo le osservazioni dell'intera orbita in un fit simultaneo. Per poter sfruttare quanto appena detto è necessario utilizzare un retrieval 2-D [32].

Per questi motivi è stato scelto di sfruttare per l'analisi di dati simulati un algoritmo 2-D⁴.

4.2.2 Test di retrieval su osservati simulati

Precedentemente è già stato rimarcato che la selezione delle MWs è stata eseguita sfruttando un algoritmo 1-D mentre l'analisi è stata effettuata con un 2-D.

Il passaggio da un algoritmo all'altro non è vincolante dal punto di vista della selezione

⁴Il programma utilizzato per l'analisi di osservati simulati è basato sull'algoritmo del GMTR (Geofit Multitarget Retrieval [33].

delle MWs poiché con il secondo si dovrebbe soltanto avere un incremento di informazione (perché si ricava l'informazione relativa ad uno spicchio da più linee di vista, figura B.1) e quindi un generale miglioramento del retrieval. Inoltre effettare una selezione di MWs sfruttando un algoritmo 2-D è un problema tutt'altro che banale poiché le variabili da considerare aumenterebbero a dismisura dovendo utilizzare oltre ad una griglia verticale anche una orizzontale e si passerebbe dall'analisi dei punti di una griglia bidimensionale a quella di una tridimensionale.

I due metodi sono quindi tra loro compatibili ma non è detto che una MW che si trova tra le più alte per figura di merito sia la più ricca in informazione anche nell'analisi 2-D. Per decidere, quindi, quali MWs faranno parte della matrice di occupazione⁵ del retrieval non sarà considerato solamente il loro valore di information gain ma anche quello dell'information load (Ω , appendice B sezione B.4).

L'analisi di Ω fornisce uno strumento per valutare le performance delle MWs quando sono usate in un'analisi di retrieval. In linea di principio è utile scegliere di utilizzare principalmente le MWs che hanno un alto Ω sugli intervalli di quota analizzati. Quelle con un basso Ω solitamente sono escluse dall'analisi ma si può decidere di considerarle perché anche se non aumentano il contenuto di informazione della matrice di occupazione possono rimuovere delle correlazioni andando a migliorare l'esito complessivo del fit.

Dopo aver scelto due opportuni set di MWs uno per PTH e l'altro per CO_2 si possono iniziare a fare le analisi di retrieval su osservati simulati. Gli step di un retrieval su osservati simulati sono i seguenti:

- generare gli osservati simulati con un forward model; in questo stadio sono usati profili di distribuzione in altezza di riferimento dell'atmosfera standard IG2 [34]. I parametri osservazionali sono stati presi da un'orbita reale di MIPAS (vedi sezione 2.1 capitolo 2).
- fare l'analisi di retrieval sugli osservati simulati usando profili ipotizzati ottenuti applicando perturbazioni casuali ai profili di riferimento. Si ottiene così un set di profili perturbati che divento i profili iniziali.
- 3. valutare la precisione del retrieval comparando i valori ottenuti con i valori di riferimento usati per generare gli osservati simulati.
- valutare la risoluzione verticale e orizzontale dei prodotti tramite l'Average Kernel 2D.

I risultati di questi step sono mostrati nelle figure 4.3 (in cui \tilde{A} " riportata una MW per un caso generico), 4.4 e 4.5(e) e 4.5(f). Nella figura 4.5 i profili sono rappresentati sotto forma di mappe ottenute interpolando tra loro i valori e utilizzando delle tabelle di colori per mo-

⁵La matrice di occupazione è una matrice logica che indica quali MWs possono essere utilizzate ad ogni quota considerata.



Figura 4.3: In 4.3(a) è mostrato in blu lo spettro simulato e in nero lo spettro osservato con la relativa differenza all'inizio del fit. In 4.3(b) sono mostrati gli stessi spettri ma dopo l'ultima iterazione del fit.



Figura 4.4: Profilo di H_2O per un caso generico. In blu è riportato il profilo ricavato dalla procedura di fit. Per ogni punto analizzato sono riportate le relative barre di errore, i numeri vicini sono i valori di information gain per tale quota. In azzurro è riportato il profilo iniziale con tratteggiate le relative incertezze nel caso in cui durante il fit l'informazione ottenibile dagli osservati sia troppo bassa e si utilizzi come informazione *a-priori*.

strare graficamente il loro andamento. Dalla figura 4.5(b) alla figura 4.5(d) sono raffigurati tutti gli step appena descritti per un retrieval su osservati simulati. Nelle mappe di figura 4.5 sono rappresentati 80 profili.

Per risolvere un problema di minimizzazione del χ^2 è necessario fare delle iterazioni poiché la prima soluzione trovata non è mai la migliore e le iterazioni vengono ripetute finché il risultato ottenuto non è inferiore ad un valore prestabilito. Nella figura 4.3(a) si vede che il primo spettro simulato (in azzurro) è molto simile a quello osservato (in nero) ma ci sono zone in cui la differenza è significativa. Alla fine del fit (figura 4.3(b)) le differenze sono molto minori e i due spettri sembrano quasi coincidenti.

L'atmosfera di riferimento che è stata utilizzata per questa ricerca è un'atmosfera standard IG2 del mese di Gennaio mentre i dati spettroscopici per il forward model sono stati presi dal database HITRAN 2012 [35], sia in fase di selezione che di analisi.

Per lo spettro iniziale sono applicate allo spettro sintetico precedentemente simulato le seguenti perturbazioni:

- 1 K per la T,
- 2% per la P,
- 10% per il VMR dell' H_2O ,
- 1% per il VMR di CO_2 (10% in alcuni test),
- 40% per il continuo.



Figura 4.5: Passaggi fondamentali di una procedura di fit. In 4.5(a) è raffigurata la mappa dei profili di riferimento in un'analisi di retrieval generati da un forward model. In 4.5(b) è mostrata la mappa dei profili iniziali (osservati) ottenuti perturbando in modo casuale i profili di riferimento. In 4.5(c) è rappresentata la mappa dei profili ottenuti come risultato della procedura di fit. In 4.5(d) sono rappresentate le differenze tra i valori ottenuti dal fit e quelli di riferimento. In 4.5(e) e 4.5(f) sono mostrati i valori della risoluzione orizzontale e verticale ricavate dall'Averaging Kernel.

Come detto nell'appendice B.2, per riuscire a ricavare i profili di VMR di una molecola è necessario conoscere le distribuzioni di P e T. In questa ricerca sono stati testati due diversi approcci al problema: il retrieval in cascata e il Multi-Target Retrieval (MTR).

Solitamente il problema è affrontato con un analisi in cascata ossia si ricavano prima i profili di P e T e poi, sequenzialmente, quelli di VMR dei target. Uno svantaggio di questo approccio è che gli errori di retrieval relativi a P T vanno propagati nei retrieval dei VMR. Inoltre, specie molecolari con uno spettro "ricco" (come $H_2O e O_3$) possono propagare i loro errori di misurazione negli altri prodotti poiché le loro transizioni spesso contaminano gli intervalli di frequenza analizzati per il retrieval delle altre specie. Il processo della propagazione degli errori può essere minimizzato con un'accurata scelta sia dell'intervallo spettrale analizzato (selezione delle MWs) sia della sequenza di retrieval. Tuttavia, la propagazione dell'errore non può essere del tutto evitata e la sua valutazione richiede alcune operazioni di post-processamento. Una strategia per minimizzare questi errori sistematici è rappresentata dal retrieval simultaneo di tutte le quantità le cui correlazioni nello spettro osservato sono la causa degli errori sistematici. Questa è la stategia del MTR, i cui principali vantaggi sono i seguenti:

- 1. evita la propagazione degli errori causati da specie interferenti.
- L'errore causato dalla sovrapposizione delle forme spettrali dei target analizzati simultaneamente è propriamente rappresentata nella matrice covarianza dei parametri ricavati.
- 3. La selezione dell'intervallo spettrale non è più guidata dalla necessità di ridurre le interferenze tra le specie target.
- 4. L'informazione su P e T può essere estratta da tutte le transizioni spettrali delle specie target e non solo dalle transizioni della molecola scelta per il retrieval di P e T.

Come è già stato detto più volte, in questa ricerca sono usate le transizioni rotazionali dell' O_2 per determinare i profili di T e P. Tuttavia non è stato possibile utilizzare solo queste forme spettrali a causa delle transizioni dell' H_2O che inquinano fortemente la regione del FIR; a tal punto che il continuo atmosferico in realtà è completamente determinato dalle code delle larghe transizioni dell' H_2O . Per questo motivo il retrieval con la strategia in cascata della CO_2 è preceduto da un retrieval MTR di T, P e VMR dell' H_2O .

L'unico vincolo adottato nel processo di retrieval è l'optimal estimation con un'incertezza del 200% a tutte le quote dell'informazione *a-priori* utilizzata. Questo debole vincolo ha il solo scopo di evitare che le matrici diventino singolari a causa della carenza di informazioni relativa a un target che può essere riscontrata a certe quote (solitamente le basse).

Capitolo 5

Risultati e discussione

In questo capitolo sono presentati i risultati ottenuti sia nella fase di selezione delle MWs che di analisi delle stesse. Saranno riportati i database di MWs selezionate per entrambe le regioni spettrali d'indagine. Sarà spiegato come sono stati scelti i set da sottoporre all'analisi da un punto di vista pratico e saranno infine valutate le performance ottenibili con lo strumento ipotizzato per questa ricerca¹.

5.1 Database di microwindows

Con i criteri esposti nel paragrafo 4.1.2 del capitolo 4 è stato possibile ottenere un database costituito da 14 MWs per la regione del FIR. Queste sono ottimizzate per il retrieval di PTH, la metà sono cresciute attorno a transizioni dell'O₂. Le altre 7 MWs selezionate si sono espanse attorno a transizioni dell'H₂O perché a causa della sua abbondanza in questa regione spettrale è stato necessario inserire questa molecola come target per il calcolo dell'information gain. Inizialmente si era tentato di ricavare solamente pressione e temperatura considerando in prima istanza l'H₂O come inquinante e quindi associandogli un errore ma questo "esplodeva" guidando le sorti del retrieval. Alternativamente si era tentato anche di tenere l'H₂O nel vettore di retrieval senza, tuttavia, considerare il suo contributo nell'information gain. Anche in questo secondo caso gli errori sistematici diventavano predominanti per questo parametro facendo perdere credibilità all'intero risultato della selezione. Inoltre, durante la fase di selezione ci siamo accorti che la linea del continuo atmosferico in questa regione porta informazioni relative all'H₂O, poiché, come già detto, il continuo atmosferico può essere completamente inglobato dalle code delle larghe transizioni di H₂O. Quanto appena detto fa sì che l' H_2O sia un target essenziale da considerare affinché il retrieval dia risultati affidabili e fisicamente sensati.

¹I risultati esposti nella sezione 5.1 e C.1 sono stati ottenuti grazie al lavoro svolto presso il dipartimento AOPP dell'Università di Oxford

MW	Numero d'onda [cm ⁻¹]			Quota [Km]			Misure	Inf. gain [bit]
1	117.840	-	118.336	6	-	68	2108	137.04
2	163.264	-	163.728	9	-	60	1740	31.96
3	156.052	-	156.548	9	-	68	1984	26.27
4	170.244	-	170.740	6	-	68	2108	15.37
5	106.132	-	106.508	6	-	68	1598	10.05
6	175.760	-	176.256	6	-	68	2108	6.69
7	161.128	-	161.624	6	-	68	2108	4.85
8	94.772	-	95.016	18	-	68	793	4.34
9	169.076	-	169.572	6	-	68	2108	3.32
10	150.280	-	150.776	6	-	68	2108	2.56
11	172.980	-	173.476	9	-	68	1984	2.27
12	163.732	-	164.232	6	-	68	2125	3.06
13	119.524	-	120.020	6	-	68	2108	1.84
14	177.160	-	177.656	6	-	68	2108	1.46
]	Fota	le	27088	251

In tabella 5.1 sono riportate le MWs selezionate per il database PTH con i relativi intervalli spettrali, l'information gain e il numero di misure in esse contenuto. In figura 5.1 è riporta-

Tabella 5.1: Elenco delle MWs ottimizzate per il retrieval di PTH ordinate secondo la figura di merito. La MW 12 ha un inf. gain maggiore delle due precedenti ma è comunque posizionata dopo perché nell'*a-priori* utilizzata per la sua selezione sono utilizzate anche le informazioni relative alle precedenti e una fluttuazione di questo tipo è giustificabile.

ta, come esempio, la prima MW selezionata per il retrieval. In questa si possono apprezzare una transizione dell'O₂ e una transizione molto intensa e molto larga dell'H₂O. In questa figura la MW è rappresentata usando la scala logaritmica per la radianza perché in questo modo si possono apprezzare le intensità di tutte le transizioni delle molecole che cadono in tale intervallo. In figura 5.1 si vede che tutti gli inquinanti hanno forme spettrali con intensità trascurabili in questa MW perché sono al di sotto del NESR che è pari a 5 nW (linea blu tratteggiata). Nell'appendice C è riportata la medesima figura in scala non logaritmica in cui è molto più facile apprezzare le transizioni, di intensità non trascurabile, che popolano questo intervallo spettrale. La scala non logaritmica mostra inoltre che tutti gli inquinanti ben visibili nella figura 5.1 non sono apprezzabili senza espandere la scala. Nella figura C.4, infatti, si notano solamente delle piccolissime gobbette azzurre dovute all'O₃ sul fondo. La prima MW del database è la più ricca dal punto di vista dell'information gain ma è quella che ha gli errori sistematici meno stabilizzati, infatti, ogni successiva MW oltre ad aumen-



Figura 5.1: MW 1 ottimizzata per il PTH. Le principali forme spettrali appartengono ad O_2 in verde e H_2O in blu. Le altre molecole (inquinanti) qui presenti hanno transizioni con intensità inferiori al NESR, linea blu tratteggiata.

tare l'infomation gain complessivo della matrice di occupazione diminuisce gli errori sistematici associati al retrieval. Questo è facilmente visibile confrontando, ad esempio, l'errore sistematico causato dall'O₃ o da NO₂ sulla T per la MW 1 (figura 5.2(a)) e per la MW 14 (figura 5.2(b)). Ponendo l'attenzione sull'intensità dell'errore dovuto ad O₃, ad esempio, si può notare che nella prima MW è superiore a 10^{-2} K mentre nella seconda è al di sotto di 10^{-2} K ad ogni quota. Nei grafici riportati in figura 5.2 si può notare come il retrieval sia guidato completamente dagli errori random (RND, linea grigia) in ogni step del retrieval e che che in entrambe le MWs RND tende a coincidere ad ogni quota con l'errore totale (TOT, linea nera) sul retrieval.

Dopo aver ottimizzato il set di MWs per il retrieval di PTH si è studiato il problema relativo al set di MWs per la CO₂. In questo caso anziché un solo set di MWs ne sono stati ricavati due utilizzando informazioni *a-priori* diverse per trovare la prima MW. Questo ha consentito di valutare se l'informazione *a-priori* fornita dalla quattordicesima MW del set per PTH favorisce un retrieval migliore della CO₂. Questo significa valutare se l'information gain complessivo del database per la CO₂ trovato utilizzando l'informazione *a-priori* proveniente dal FIR è maggiore di quello del database ricavato utilizzando un'informazione *a-priori* climatologica. Questo test è di fondamentale importanza poiché le transizioni dell'ossigeno molecolare che sono la principale fonte di informazione sulla T si trovano in una zona in cui la planckiana è in fase crescente ma non sul massimo e questo potrebbe far sì che le informazioni che provengono dal FIR siano assolutamente trascurabili rispetto a quelle provenienti dal TIR dove siamo sul massimo della planckiana. Le transizioni dell'ossigeno molecolare sono la maggior fonte di informazione sulla T perché tutte le altre transizioni molecolari presenti all'interno della MW portano informazioni su questo parametro con un diverso grado di incertezza. Nella tabella 5.2 sono riportate le MWs ottenute con l'informazione *a-priori* climatologica mentre nella tabella 5.3 quelle con l'*a-priori* dal FIR. In figura 5.3 è riportata una MW esemplificativa per tutte quelle indicate nelle tabelle 5.2 e 5.3. Dal momento che lo scopo della tesi è ricavare la CO₂ utilizzando l'informazione *a-priori* derivante dal FIR nella figura è riportata la prima MW della tabella 5.3. In questa si nota che oltre alle intense transizioni della CO₂ si hanno forme spettrali significative anche di O₃ che non a caso è il principale inquinante in questa regione. L'H₂O qui non è uno dei principali inquinanti perché in questa regione vi cadono poche delle sue transizioni vibrorotazionali con un'intensità spesso tutt'altro che rilevante rispetto a quella delle molecole principali. Infatti, anche nella figura 5.3 la riga dell'H₂O ha un massimo intorno a 100 nW mentre una della CO₂, ad esempio, intorno a 7000 nW.

Dagli information gain complessivi dei database (39 bit contro 56 bit) si desume senza incertezze che si guadagna più informazione sulla CO_2 utilizzando l'informazione *a-priori* derivante dal FIR. Questo resta vero anche se per calcolare l'information gain complessivo per il database con l'*a-priori* dal FIR utilizziamo solo le prime 10 MWs riportate in tabella 5.3 (55 bit). Questa è la prima dimostrazione che la strada di utilizzare le informazioni su P e T ottenute dal FIR è più che percorribile. Inoltre, è interessante notare che delle 10 MWs ottenute utilizzando l'informazione *a-priori* climatologica solamente 5 sono sovrapposte ad



Figura 5.2: Sono riportati gli error budget relativi al target T, per la prima MW del database e per l'ultima. Si vede chiaramente come il retrieval sia guidato in entrambe principalmente dagli errori random (RND). Nell'ultima MW del retrieval si vede che gli errori relativi ad O_3 e NO_2 sono diminuiti sensibilmente rispetto alla prima MW.

MW	Numero d'onda [cm ⁻¹]			Quota [Km]			Misure	Inf. gain [bit]
1	702.108	-	702.308	6	-	68	850	18.85
2	818.676	-	818.856	6	-	68	765	8.28
3	698.752	-	698.944	12	-	60	720	5.29
4	812.372	-	812.556	6	-	68	782	3.23
5	820.116	-	820.316	6	-	68	850	1.54
6	821.776	-	821.996	18	-	68	715	0.69
7	823.316	-	823.516	21	-	68	600	0.55
8	772.032	-	772.228	18	-	68	637	0.42(7)
9	817.156	-	817.348	18	-	68	624	0.42(9)
10	765.808	-	766.004	18	-	68	637	0.18
				Totale			7180	39

Tabella 5.2: Elenco delle MWs ottimizzate per il retrieval di CO₂, utilizzando come informazione *apriori* quella climatologica per selezionare la prima MW, ordinate in funzione della figura di merito.

altre ottenute con l'informazione *a-priori* derivante dal FIR². Questo è dovuto al fatto che l'errore sistematico relativo all'O₃ nel caso dell'*a-priori* dal FIR possiede un'informazione *a-priori* costruita meglio che nell'altro caso. Inoltre, la conoscenza *a-priori* relativa alla T, alla P e all'H₂O ha un grado di incertezza molto minore rispetto a quello che si avrebbe utilizzando l'informazione climatologica poiché questi parametri sono già stati modellati utilizzando le informazioni del FIR. La prima miglior MW dei due set è diversa e così i relativi error budget mostrati in figura 5.4(a) e figura 5.4(b). In entrambi i casi il retrieval è dominato prevalentemente dall'errore RND ma nel caso dell'*a-priori* climatologica ci sono quote in cui tale errore ha un peso minore rispetto a quello dovuto all'O₃ o al non equilibrio termodinamico (NLTE_IR). Nel caso dell'*a-priori* climatologica l'errore sul retrieval per la prima MW è molto maggiore dell'1% mentre nell'altro è poco al di sopra di tale soglia. A selezione completa nel primo caso l'errore totale è poco sopra l'1% mentre nel secondo è poco al di sotto.

Come già accennato nella sezione 4.1.2 sono stati ricavati dei database di MWs considerando nel vettore degli errori sistematici anche gli errori strumentali. Questi database sono riportati nell'appendice C.1.

Le MWs riportate nella tabella C.1 sono semplicemente un sottoinsieme delle 15 MWs riportate nella tabella 5.1 il cui information gain è ovviamente diminuito. Questo perché ogni errore sistematico aggiunto determina una diminuizione dell'information gain. Gli errori

²Le MWs ottenute con l'informazione *a-priori* climatologica numero 2, 5, 6, 7 e 8 sono sovrapposte alla numero 2, 6, 7, 4, 14 ottenute con l'informazione *a-priori* derivante dal FIR, rispettivamente.

MW	Numero d'onda [cm ⁻¹]			Quota [Km]			Misure	Inf. gain [bit]
1	760.252	-	760.484	6	-	68	986	40.85
2	818.664	-	818.856	6	-	68	816	5.85
3	700.884	-	701.108	15	-	68	784	2.49
4	823.344	-	823.472	6	-	68	544	1.56
5	758.760	-	758.924	6	-	68	697	1.20
6	820.116	-	820.312	12	-	68	735	0.79
7	821.756	-	821.984	15	-	68	798	0.62
8	702.112	-	702.304	15	-	68	672	0.54
9	918.532	-	918.716	24	-	68	506	1.00
10	704.732	-	704.924	18	-	60	576	0.50
11	810.904	-	811.076	18	-	60	516	0.24
12	938.820	-	939.032	30	-	68	477	0.19
13	766.568	-	766.764	18	-	68	637	0.14(4)
14	772.004	-	772.172	21	-	68	546	0.14(7)
15	802.936	-	803.152	21	-	60	594	0.15
]	Fota	lle	9884	56

Tabella 5.3: Elenco delle MWs ottimizzate per il retrieval di CO_2 , utilizzando come informazione *a-priori* quella dell'ultima MW del set ottimizzato per il PTH, ordinate in funzione della figura di merito.



Figura 5.3: MW 1 ottimizzata per la CO_2 utilizzando l'informaziona *a-priori* derivante dalla 14esima MW per PTH. Le principali forme spettrali appartengono a CO_2 in verde e O_3 in azzurro. Le altre molecole (inquinanti) qui presenti hanno transizioni con intensità inferiori al NESR, linea blu tratteggiata, eccezion fatta per una debole transizione dell'H₂O rappresentata in blu.





(d) Error budget MW 15 FIR a-priori

Figura 5.4: Error budget per i database di MWs ottimizzati per CO_2 nella zona del TIR. In 5.4(a) e 5.4(c) sono mostrati quelli relativi alla prima e all'ultima MW, rispettivamente, del database ottenuto utilizzando l'informazione *a-priori* climatologica. In 5.4(b) e 5.4(d) sono rappresentati, invece, gli error budget relativi alla prima e all'ultima MW del database ottenuto utilizzando l'informazione *a-priori* climatologica. In 5.4(b) e 5.4(c) sono rappresentati, invece, gli error budget relativi alla prima e all'ultima MW del database ottenuto utilizzando l'informazione *a-priori* derivante dal retrieval di PTH nel FIR.

strumentali, tuttavia, non risultano troppo critici per la selezione di MWs nel FIR.

La situazione è diametralmente opposta nel TIR. Infatti, qui, gli errori strumentali pesano moltissimo sul retrieval e anche una piccola variazione di uno di questi può guidare il retrieval in una direzione completamente diversa. Confrontando i database riportati in tabella 5.2 e 5.3 con quelli riportati in tabella C.2 si può notare che solo poche MWs sono presenti sia nei database con gli errori strumentali che in quelli senza. La cosa da sottolineare è che anche in questo caso l'information gain per il set ricavato usando l'*a-priori* del FIR è maggiore di quello del set climatologico, come riportato nella tabella C.2. In questo caso la selezione delle MWs per quanto riguarda il set che usa come *a-priori* quella di una MW del FIR può cambiare anche in funzione di quale MW si decide di utilizzare per modellare l'informazione *a-priori*.

Gli errori strumentali, quindi, giocano un ruolo fondamentale in questo tipo di problema e la loro assunzione deve essere corretta perché la loro riproduzione ha un'importanza critica. Al momento non si è in grado di trovare la soluzione ottimale del nostro problema perché non si ha nessuna informazione certa relativa allo strumento e agli errori ad esso associati. Finché lo strumento non è finalizzato in questo tipo di indagine ci si può solo avvicinare quanto più possibile alla soluzione ottimale del problema. Una volta che tutte le fonti di errore associate allo strumento saranno definite così come le loro correlazioni sarà possibile ottenere database che considerano gli errori strumentali in modo più affidabile.

5.2 Selezione di microwindows per l'analisi in base al loro information load

Una volta ottenuti dei database di MWs stabili è necessario fare un'analisi di information load per decidere quali MWs siano più ricche di informazione per l'analisi di fit in 2-D. Questo tipo di analisi è necessario poiché non è detto che una MW ottima rispetto ad un'analisi 1-D lo sia anche per la 2-D. Questo è causato dalle diverse assunzioni sulla discretizzazione dell'atmosfera usate dai due approcci come spiegato nella sezione 4.2.1. Per questo tipo di analisi è stata usata un'atmosfera standard IG2 del mese di luglio. Nelle figure 5.5 e 5.6 sono riportate le mappe di information load delle matrici di occupazione scelte, come spiegato di seguito, per T e CO_2 , rispettivamente.

Per semplicità durante la scelta delle MWs più ricche in information load si sono utilizzati i profili di $W\Omega$ medio, $\widetilde{W\Omega}$. Per selezionare la matrice di occupazione per il PTH si sono valutati i singoli $\widetilde{W\Omega}$ (riportati nelle figure C.1, C.2 e C.3) prestando particolare attenzione anche alle transizioni contenute nelle MWs. Il controllo delle transizioni contenute è importante soprattutto perché le MWs contenenti H₂O hanno alti valori di $\widetilde{W\Omega}$ per la T. Le transizioni dell'H₂O, infatti, hanno realmente moltissima informazione sulla T ma con un'incertezza enorme. Per questo è stato arbitrariamente deciso di utilizzare una matrice di occupazione costituita da 6 MWs per il PTH. Di queste 4 contengono transizioni di O₂ mentre 2 contengono solamente H₂O. Le MWs contenenti solo H₂O sono state scelte per far funzionare correttamente il fit dal momento che questa è nel vettore di retrieval. Oltre alle molecole contenute nelle MWs si è prestata particolare attenzione alla copertura in quota del loro $W\Omega$. Nella figura 5.7 è riportato il valore di $\widetilde{W\Omega}$ a tutte le quote per la matrice di occupazione scelta per il retrieval di PTH. Questa è costituita dalle MWs: 1 (figura C.1(a)), 2 (figura C.1(b)), 6 (figura C.2(b)), 7 (figura C.2(c)), 10 (figura C.2(f)) e 13 (figura C.3(c)). Gli estremi delle MWs e la loro bontà per il retrieval 1-D sono riportati nella tabella 5.1. Le MWs 6 e 10 che contengono H₂O (figure C.6 e C.8) hanno dei profili di $\widetilde{W\Omega}$ molto allargati e molto intensi. Le Mws selezionate con questo criterio per il retrieval di PTH sono riportate nella sezione C.3 dell'appendice C (dalla figura C.4 a C.9).

La scelta delle MWs per la matrice di occupazione della CO_2 è stata analoga ma non prestando attenzione alle molecole contenute nelle MWs. In questo caso sono state inglobate anche 2 MWs con un $\widetilde{W\Omega}$ molto basso rispetto alle altre perché la loro presenza migliora il risultato del fit. Queste, infatti, molto probabilmente rimuovono qualche correlazione. L'information load complessivo per la matrice di occupazione della CO_2 è riportato nella figura 5.8 ed è relativo alle MWs: 1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9 e 11. Le transizioni presenti in queste MWs sono visibili nelle figure da C.10 a C.18.

I due set di MWs selezionati in questo modo sono poi stati sottoposti alle analisi su osservati simulati esposte nelle prossime sezioni.



Figura 5.5: Mappa di informiton load rispetto alla T per il set di MWs scelte come matrice di occupazione per PTH.



Figura 5.6: Mappa di informtion load rispetto alla CO₂, per il set di MWs scelte come matrice di occupazione per la CO₂.



Figura 5.7: Profilo di information load medio per la T ricavato dalla mappa mostrata in figura 5.5.



Figura 5.8: Profilo di information load medio per la CO₂ ricavato dalla mappa mostrata in figura 5.6.

5.3 Analisi su osservati simulati

In questa sezione saranno mostrati i risultati dei retrieval in cascata e in MTR, il cui funzionamento è spiegato nella sezione 4.2.2, nonché i test effettuati per scegliere i parametri di retrieval.

5.3.1 Retrieval in cascata

Come già detto nella sezione 4.2.2 fare un retrieval in cascata significa determinare prima il valore di P e T e poi sfruttare i risultati ottenuti nel retrieval per determinare il VMR della CO_2 .

Il primo test effettuato è stato sulla griglia di retrieval per PTH. Per quanto riguarda la griglia verticale sono stati fatti dei test variando le quote a cui si effettua il campionamento. Questi test hanno semplicemente dimostrato che la matrice di occupazione di MIPAS è la più idonea. Questa, casualmente, coincide con il campionamento verticale geometrico. Infatti, sfoltire il campionamento del retrieval (e cioè aumentare lo step di campionamento) alle basse quote porta ad un aumento dell'errore medio ed alla contemporanea perdita di risoluzione verticale mentre il diminuire lo step di campionamento non porta alcun giovamento significativo.

Per quanto riguarda la griglia orizzontale si sono fatti dei test con il campionamento ogni



Figura 5.9: Errori medi per ogni quota sul retrieval in cascata di PTH. In 5.9(a) sono mostrati quelli sulla T mentre in 5.9(b) quelli sulla P ottenuti utilizzando diverse griglie orizzontali di retrieval. In nero è rappresentato l'errore medio sul retrieval con la griglia orizzontale con step di 1°, in rosso quello con quella ogni 2° e in blu quello con quella ogni 3°.



Figura 5.10: Errore medio sui target del retrieval in cascata. In 5.10(a) sono mostrati gli errori medi sull'H₂O ottenuti usando diverse griglie orizzontali. In 5.10(b) sono mostrati gli errori medi sui retrieval della CO₂ effettuati con diverse griglie usando i valori per T, P e H₂O ottenuti dal retrieval di PTH con la griglia orizzontale a step di 1°.



Figura 5.11: Risoluzione orizzontale per la T (sopra) e per la CO₂ (sotto).

1°, 2°, 3°. Come si vede nella figura 5.9(a), che riporta il valore medio della differenza tra i valori ricavati e quelli di riferimento, il campionamento migliore per la T sembra essere di 3° mentre per H₂O (figura 5.10(a)) e P (figura 5.9(b)) pare essere in media 2°. Le mappe per questi errori medi sono riportate nella sezione C.4. Nonostante questi risultati facciano pensare che la scelta migliore per il campionamento orizzontale sia 2° o 3°, in realtà si è deciso di utilizzare 1°. La scelta è giustificata dal fatto che aumentare lo step di campionamento porta a una diminuzione della risoluzione orizzontale.

Come sarà dimostrato da uno dei test successivi la T è il parametro più critico per il retrie-



Figura 5.12: Test per valutare l'impatto di P, T e H_2O sul retrieval della CO_2 . In nero è riportato il risultato del caso in cui si usino i valori dei tre parametri ottenuti dal precedente retrieval. Il risultato ottenuto usando la T di riferimento è il rosso, in verde quello con il valore di H_2O di riferimento mentre in blu quello con la P di riferimento.

val della CO_2 ; per questo è necessario ricavarla con la maggior accuratezza possibile. Per far questo è opportuno che il campionamento orizzontale coincida quanto più possibile con la risoluzione orizzontale (che si determina dall'averaging kernel; si veda 5.3.4), la figura 5.11(a) che mostra la risoluzione orizzontale per un segmento di orbita di 50 sequenze dimostra che la scelta di 1° è ottima poiché la risoluzione orizzontale è compresa tra 1° e 1.5°. In figura 5.10(b) è mostrato l'errore medio per il retrieval in cascata della CO_2 dopo quello di PTH (con la griglia di 1°) effettuato con diverse griglie orizzontali, con step di 1°, 2.5° e 3°. L'errore medio per la CO_2 con campionamento di 1° coincide con quello effettuato ogni 2.5°. Si è quindi adottata come griglia orizzontale per la CO_2 quella con step di 2.5° poiché a basse e ad alte quote è migliore di quella a step di 3°. Non si è scelto la griglia con step di 1° perché a parità di errore medio con quella di 2.5° la prima richiede tempi di calcolo più lunghi senza ottenere alcun miglioramento tangibile. La risoluzione orizzontale per la CO_2 in questo caso è infatti compresa tra 2.5° e 3° (figura 5.11(b)).

Con le scelte relative alla griglia di retrieval appena spiegate sono stati fatti dei test per valutare quanto il retrieval della CO_2 sia condizionato dall'accuratezza del valore di T, P e H₂O che si assume dopo aver effettuato il retrieval di PTH. Per valutare la criticità di ciascuno di questi tre parametri è necessario fare dei test di retrieval in cui assumiamo i valori della



(a) Mappa dell'errore assoluto ($VMR_{ret} - VMR_{ref}$)



(b) Errore medio a tutte le quote per il retrieval sull'orbita

Figura 5.13

T o P o H_2O di riferimento mentre si usano i valori ricavati dal retrieval per gli altri due parametri. In questo modo è quindi possibile valutare quale tra questi tre parametri ha il maggiore impatto sull'accuratezza del retrieval della CO_2 .

Nella figura 5.12 sono mostrati i risultati dei test sopra descritti. Il profilo nero rappresenta l'errore medio utilizzando i valori di P, T e H_2O ottenuti dal retrieval. Questo non è molto diverso dai profili utilizzando il valore di H_2O ideale (in verde) o di P (ideale in blu). In rosso si vede, invece, l'enorme influenza della temperatura sulle sorti del retrieval, l'errore medio con la temperatura ideale diminuisce notevolmente. Questo risultato, quindi, conferma l'importanza che ha utilizzare un valore di T quanto più accurato possibile per ricavare la CO_2 .

Le mappe degli errori che qui sono riportati come profili di errore medio sul retrieval sono riportate nella sezione C.4.

Nella figura 5.13(a) è riportata la mappa degli errori sul retrieval della CO_2 per l'orbita intera. Dalle due figure si nota piuttosto facilmente che con questo tipo di retrieval non si ottengono risultati soddisfacenti. Le uniche quote in cui si ottengono informazioni con una buona precisione sono quelle comprese tra 20 e 40 Km, ossia solo in piena stratosfera. L'errore medio sulla determinazione della CO_2 in questo intervallo è di circa 1 ppm (si veda la figura 5.13(b)). Poiché la CO_2 in stratosfera deriva principalmente dalle attività umane è opportuno trovare una strategia migliore che consenta di arrivare anche a quote più basse almeno in stratosfera. Sarebbe inoltre auspicabile riuscire a determinare la CO_2 con una buona precisione anche in alta troposfera.

5.3.2 Multi-Target Retrieval (MTR)

Dal momento che tutte le transizioni presenti in una MW portano informazioni sulla T e proprio questo è il parametro più critico per la buona riuscita del retrieval della CO_2 si è ritenuto opportuno valutare i risultati di un approccio MTR al problema. Questa strategia come mostrato nella figura 5.17(a), descritta in seguito, è molto più efficace. Anche in questo caso è necessario testare diverse griglie di retrieval per valutare quale sia la migliore. Per quanto riguarda il campionamento verticale è stata mantenuta anche per l'analisi MTR la matrice di occupazione standard di MIPAS poiché diradare il campionamento alle basse quote non ha portato nessun beneficio. Per il campionamento orizzontale, invece, sono stati fatti dei test di retrieval utilizzando step di 1°, 1.5°, 2° e 3°. In figura 5.14 sono riportati gli errori medi sui retrieval in MTR per la CO_2 e per la T. In nero è riportato il caso in cui si campioni ogni 1°, in rosso ogni 1.5°, in blu ogni 2° e in verde ogni 3°. Il miglior compromesso è stato valutato il caso di un campionamento ogni 2°, perché consente di non perdere troppo in risoluzione orizzontale diminuendo al contempo l'errore medio.

Dal momento che per il retrieval in MTR qui trattato utilizziamo MWs che contengono in-



Figura 5.14: Errore medio sul retrieval in MTR per T in 5.14(a) e per CO₂ in 5.14(b).



(b) CO2

Figura 5.15: Confronto tra test di retrieval con target T, P, $H_2O e CO_2$ usando le MWs ottimizzate per PTH, profilo nero, non utilizzando queste MWs, profilo rosso, e considerando come target solo T, P e CO₂. I risultati sono riportati per la T nel pannello (a) e per la CO₂ nel pannello (b).



(a) Mappa dell'errore assoluto ($VMR_{ret} - VMR_{ref}$)



(b) Errore medio sul retrieval dell'orbita

Figura 5.16



Figura 5.17: Profilo dell'errore medio per la CO₂ (pannello (a)) e per la T (pannello (b)). Il retrieval in MTR è rappresentato in nero, quello in cascata in rosso.

formazioni provenienti sia dal FIR che dal TIR³ è necessario verificare che le informazioni sulla T provengano principalmente dalle MWs che sono state ottimizzate per PTH. Il rischio è, infatti, che le MWs del TIR contengano talmente tanta informazione sulla temperatura da non usare quella proveniente dal FIR.

Si è quindi fatto un test di retrieval ricavando T, P, H₂O e CO₂ utilizzando solamente le MWs ottimizzate per la CO₂. In questo caso il profilo di errore medio è rappresentato dalla linea rossa nella figura 5.15. Il risultato, come ci si aspettava, è stato che le MWs del TIR non sono autosufficienti per questo tipo di retrieval e quindi il maggior contributo all'informazione sulla temperatura proviene dalle MWs del FIR, infatti l'errore medio mostrato dal profilo nero (rappresentante il retrieval utilizzando tutte le MWs) è minore. Per essere certi che a guidare le sorti del retrieval non fosse la carenza di transizioni di H₂O nella regione del TIR è stato condotto un ulteriore test MTR utilizzando solo le MWs ottimizzate per la CO₂ rimuovendo l'H₂O dal vettore dei target. Il risultato del retrieval anche in questo caso è comunque peggiore ed è mostrato dal profilo blu in figura 5.15.

Con questo approccio è quindi possibile ricavare il valore della CO_2 con una precisione che va da 1 a 5 ppm in un range che va da 20 Km fino a 60 Km circa, come mostrato nella figura 5.16(b). Nella figura 5.16(a) è riportata la mappa dell'errore sul retrieval dell'orbita totale. Anche solo confrontando la mappa mostrara in 5.16(a) con quella mostrata in 5.13(a) si vede che il retrieval in MTR dà risultati di gran lunga migliori di quello in cascata. Il confronto tra gli errori medi, che ha il solo scopo di confermare quanto appena detto, è mostrato nella figura 5.17 sia per la T che per CO_2 . Con il retrieval in MTR si guadagnano diversi centesimi di K di precisione per la T e senza dubbio possiamo spingerci un po' più in basso in quota per la CO_2 . L'errore totale sul retrieval in MTR è maggiore di circa 2/3 ppm di quello in cascata per la CO_2 tra 30 e 40 Km in corrispondenza della grande macchia rossa posta a circa 180°, in figura 5.16(a). Questa può essere dovuta alla grossa perturbazione (10%) a cui è sottoposto il profilo di CO_2 ottenuto dal forward model nel retrieval in MTR (per quello in cascata la perturbazione sul profilo iniziale della CO_2 era pari all'1%).

Tutte le mappe dei profili di errore medio qui mostrati sono riportati nella sezione C.5 eccetto quelle per il confronto tra il retrieval in cascata e in MTR per la CO_2 che sono mostrate nelle figure 5.13(a) e 5.16(a), rispettivamente.

5.3.3 Risultati con Look-Up Tables (LUT)

I risultati esposti fino ad ora sono stati ottenuti con un programma che effettua i calcoli delle sezioni d'urto con un metodo Line-By-Line (LBL) che fa uso di varie approssimazioni che riguardano, in particolare, le dipendenze del profilo di riga (profilo di Voigt) dalla temperatura.

³In questo retrieval sono usate tutte le MWs raffigurate nella sezione C.3.

Mentre si era in uno stadio avanzato degli studi precedentemente esposti (sezioni 5.3.1 e 5.3.2) è stato possibile calcolare con un programma apposito [36] le look-up tables (LUT) per le nostre analisi.

Le LUT sono file in cui vengono conservati i valori delle sezioni d'urto delle molecole atmosferiche. Questo consente di risparmiare moltissimo tempo di calcolo poiché il programma non deve calcolare le sezioni d'urto direttamente ogni volta.

Le LUT sono precalcolate in funzione di griglie molto fitte di pressione e temperatura. Nel caso in cui il valore della sezione d'urto di interesse non sia tabulato, il programma effettua un'interpolazione dei dati e calcola il valore cercato alla pressione e temperatura di interesse.

Oltre ai tempi di calcolo sensibilmente minori questi file hanno consentito di migliorare la qualità del retrieval della CO₂ poiché non hanno tutte le approssimazioni dei calcoli LBL precedentemente utilizzati.

Il calcolo dell'orbita completa mostrata nella figura 5.16(a) ha impiegato un tempo di circa 4 giorni mentre il calcolo dell'orbita utilizzando le stesse condizioni ma sostituendo i calcoli LBL delle sezioni d'urto con l'uso delle LUT ha richiesto poco più di 4 ore. Inoltre anche la qualità del retrieval è migliorata sensibilmente come si può vedere anche dal solo confronto visivo delle mappe mostrate in 5.16(a) per il LBL e 5.18(a) per le LUT. Nella figura 5.19 sono riportati i profili dell'errore medio sul retrieval usando le LUT o usando il metodo LBL e si vede che con l'uso delle LUT si guadagna almeno circa 1/2 ppm in precisione a quasi tutte le quote. Si è inoltre notato che al centro della mappa attorno ai 180° come coordinata orbitale e 30/40 Km di altezza anche utilizzando le LUT si hanno delle "macchie" con un errore assoluto molto più alto che sono la causa della gobba intorno ai 30/40 Km che ha anche questo profilo medio, mostrato in figura 5.18(b) (Lo stesso andamento è visibile per il LBL in figura 5.16(b)). Nel retrieval in cascata le perturbazioni applicate alla CO_2 e all'H₂O erano diverse. Il profilo della prima era perturbato dell'1% mentre quello della seconda del 10% questa differenza di perturbazioni è dovuta alla diversa variabilità che hanno queste due molecole in atmosfera. Nei fit in MTR fino ad ora mostrati si è usata la stessa perturbazione dei VMR sia per H₂O che per CO₂ pari al 10%. Poiché una variazione del 10% nel VMR della CO₂ non è realistica si è testato il risultato utilizzando anche nel retrieval in MTR una diversa perturbazione sui profili ottenuti dal forward model. I risultati ottenuti in questo caso sono migliori come mostrato nella figura 5.20 in cui è riportato il confronto tra le due perturbazioni. Il profilo nero mostra l'errore medio del retrieval perturbando la CO₂ dell'1% mentre quello rosso mostra quello con la perturbazione del 10%. Da questa figura si vede chiaramente che applicando una perturbazione dell'1% si guadagna qualche ppm alle alte quote ma soprattutto nella zona compresa tra 20 e 40 Km si guadagna dai 2 ai 4 ppm in precisione sul retrieval. Nella figura 5.21 è mostrata la mappa dell'errore





(b) Profilo dell'errore medio

Figura 5.18: Risultati del retrieval effettuato con l'uso delle LUT. In figura 5.18(a) si vede l'errore assoluto per ogni punto mentre nella 5.18(b) si vedere il profilo dell'errore medio sul retrieval.


Figura 5.19: Confronto tra l'errore medio sul retrieval effettuato con le LUT, in rosso, e LBL, in nero.



Figura 5.20: Confronto tra il retrieval ottenuto con perturbazioni del 10% del profilo iniziale della CO_2 , in rosso, e con l'1%, in nero.



per il retrieval della CO_2 utilizzando le LUT e perturbando il profilo di riferimento della CO_2 dell'1%.

Figura 5.21: Mappa degli errori su ogni profilo del retrieval in MTR della CO₂ utilizzando le LUT e una perturbazione dell'1% sul profilo di riferimento della CO₂.

5.3.4 Risoluzione spaziale

È possibile valutare la risoluzione spaziale valutando gli elementi dell'Averaging Kernel (AK), si veda l'appendice B.3.3.

La risoluzione verticale di un parametro è valutata come l'ampiezza a metà altezza della forma triangolare identificata dal set di elementi della matrice AK relativo all'altezza (colonna). La risoluzione orizzontale, analogamente, è ricavata valutando l'ampiezza a metà altezza della forma identificata dal vettore costituito dal set di elementi posto su una riga della matrice AK. Un esempio di forma usata per valutare la risoluzione orizzontale è riportata nella figura 5.22. La forma per la risoluzione verticale è analoga a quella riportata nella figura precedentemente mostrata.

Un retrieval ottimale è quello che ha l'intervallo di campionamento geometrico dell'atmosfera (orizzontale o verticale) coincidente con la risoluzione spaziale.

In figura 5.23 è riportata la mappa della risoluzione orizzontale per la CO_2 mentre nella 5.24 è riportata la mappa di quella verticale. Entrambe le figure si riferiscono al retrieval i cui errori sono riportati nella figura 5.21. In questo retrieval MTR si è assunto un intervallo di campionamento verticale alle basse quote (da 6 Km fino a 42 Km) di 3 Km mentre il



Figura 5.22: Rappresentazione di una riga dell'Averaging Kernel usata per valutare la risoluzione orizzontale.

campionamento orizzontale è di 2°.

Come si vede in figura 5.24 la risoluzione verticale tra 6 e 42 Km è 3 Km e va a diminuire alle quote più alte quindi perfettamente in linea con l'intervallo di campionamento scelto. La risoluzione orizzontale invece tra 6 e 30 Km è compresa tra 2.5° e 3° mentre da 30 Km in su è compresa tra 2° e 2.5° . La griglia di campionamento orizzontale nel nostro caso è stata posta ogni 2° quindi è più fitta della risoluzione. Il fatto di usare una griglia orizzontale più fitta della risoluzione non fa guadagnare in informazione ma porta a una leggera diminuzione di precisione poiché aumenta il numero di parametri da determinare. Potrebbe quindi essere utile ai fini dell'errore medio sul retrieval utilizzare una griglia orizzontale con campionamento ogni 2.5° .



Figura 5.23: Risoluzione orizzontale per il retrieval della CO₂.



Figura 5.24: Risoluzione verticale per il retrieval della CO₂.

Capitolo 6

Conclusioni e sviluppi futuri

L'obiettivo di questa ricerca era quello di trovare una strategia alternativa a quella proposta dallo strumento ACE per cercare di ricavare i profili di VMR della CO_2 in atmosfera svincolandosi dall'utilizzo di questa molecola per ricavare sia il profilo del proprio VMR che quelli di P e T.

In questo lavoro la molecola utilizzata per ricavare i valori di P e T è l' O_2 le cui transizioni rotazionali pure sono ben visibili in atmosfera nella regione del FIR.

Per quanto riguarda lo strumento satellitare da utilizzare sono state fatte delle ipotesi sui parametri strumentali e osservazionali ispirandosi a strumenti già impiegati o progettati per misure atmosferiche.

Ai fini di valutare le performance dello strumento ipotizzato è stato necessario selezionare idonei intervalli spettrali (microwindows) da analizzare sia per il FIR che per il TIR dove compaiono le transizioni vibrorotazionali della CO_2 . Per questa selezione è stato utilizzato un algoritmo basato sull'optimal estimation, appositamente sviluppato¹. In questo modo sono stati costruiti due database, entrambi di 15 MWs, uno per il FIR e l'altro per il TIR. In questa fase si è verificato che le MWs scelte nel TIR a partire da un'informazione *a-priori* climatologica possiedono un information gain minore di quelle che sono selezionate usando l'*a-priori* proveniente dalla selezione del FIR.

Partendo da questi database sono state selezionate, attraverso un'analisi di information load, 6 MWs nella regione del FIR ottimizzate per il retrieval di PTH e 9 MWs nella regione del TIR ottimizzate per il retrieval della CO_2 .

Per stabilire le performance dell'esperimento in esame si è adottato la strategia delle analisi effettuate su osservati simulati. Con questa si è constatato che un retrieval multi-target produce risultati migliori di uno in cascata. La griglia di retrieval scelta è idonea per quanto riguarda il campionamento verticale, infatti la risoluzione verticale coincide con il campionamento di 3 Km scelto. Non si può dire lo stesso per la griglia orizzontale scelta; per

¹Questo algoritmo è stato sviluppato presso l'Università di Oxford.

questa infatti si è deciso di adottare una spaziatura di 2° mentre dalla valutazione della risoluzione orizzontale è risultata più idonea una spaziatura di 2.5 °. Sarà pertanto necessario effettuare nuovi test discriminatori per ottimizzare la spaziatura del campionamento della griglia orizzontale. Soprattutto sarà importante discriminare tra la precisione ottenuta con uno step 2° e quella con uno di 2.5°.

Sia in fase di selezione dei database di MWs che in fase di analisi si è dimostrato che i risultati ottenuti sfruttano maggiormente l'informazione sulla T proveniente dalla regione (e quindi dalle MWs) del FIR. Quindi il TIR non è autoconsistente per il retrieval dei profili di T, P e CO₂. Utilizzando l'informazione del FIR, infatti, si guadagnano almeno 2 ppm in precisione sul retrieval della CO₂ a tutte le quote. Sulla T non si ha un guadagno così significativo nell'intervallo di quota tra 20 Km e 40 Km perché nel TIR si ha veramente molta informazione sulla T ma questa non è sufficiente se il numero di parametri da determinare include anche i valori di VMR della CO₂.

Durante le analisi i calcoli delle sezioni d'urto sono stati effettuati sia usando un metodo approssimato LBL che utilizzando le LUT. Si è visto che con il secondo non solo si è aumentata molto la velocità di calcolo ma (come ci si aspettava) si sono ottenuti anche risultati molto più precisi.

Si è verificato che applicare perturbazioni non fisiche al VMR di una molecola guida in negativo le sorti del retrieval. È quindi importante valutare bene da un punto di vista fisico (ossia di variabilità stagionale della molecola) le perturbazioni da applicare ai profili utilizzati per simulare gli osservati con il forward model.

Con lo strumento ipotizzato, con le assunzioni usate sui parametri di retrieval (matrice di occupazione di MIPAS, campionamento orizzontale ogni 2°, perturbazione sulla CO_2 dell'1%) e utilizzando le MWs selezionate in questo studio, si ottengono profili di VMR della CO_2 con un errore medio accettabile (entro i 5 ppm) da 10 a 68 Km. Errori assoluti superiori ai 10 ppm si hanno prevalentemente alle bassissime quote.

Si può quindi concludere che è possibile ricavare i profili di VMR della CO_2 con l'approccio descritto in questa tesi con una precisione pari ad 1 ppm nell'intervallo di quote compreso tra 20 Km e 45 Km, sopra questo intervallo la precisione è compresa tra 1 e 2 ppm mentre al di sotto è compresa tra 2 e 4 ppm. I valori di precisione qui descritti sono relativi al singolo profilo. Se si considerano medie latitudinali (attualmente le uniche disponibili alla climatologia) si ottengono errori ridotti del fattore dovuto al processo di media e quindi risultati di grande qualità.

In futuro sarà certamente necessario ripetere tutto il processo descritto per testare risoluzioni diverse come ad esempio quella di MIPAS di 0.025 cm⁻¹ oppure una risoluzione intermedia di 0.01 cm⁻¹.

Sarà necessario inoltre affinare i database di MWs considerando tutti gli errori strumentali

una volta che saranno decise con maggior certezza le caratteristiche strumentali.

Appendice A

Geometrie di osservazione

La geometria con cui lo spettro atmosferico può essere osservato è definita dall'orientazione della linea di vista e dalla posizione dell'osservatore.

Quest'ultima può essere al suolo, su un aereo, su un pallone stratosferico o su un satellite. La linea di vista, invece, può essere orientata sia in direzione orizzontale guardando al lembo della terra (limb sounding) o in direzione verticale (vertical sounding). Quest'ultimo può avere due diverse geometrie al nadir, linea di vista verso il basso, o allo zenith, verso l'alto.

È possibile sfruttare diverse combinazioni di queste due variabili. Storicamente le regioni del lontano infrarosso e delle microonde sono state usate per osservazioni da satellite e da palloni stratosferici sia al lembo che al nadir. Da aerei e da terra prevalgono le osservazioni allo zenith. Allo stato attuale la geometria al lembo sta prendendo sempre più campo nelle misurazioni da satellite. Le tre geometrie di osservazione sono mostrate nella figura 1.2 del capitolo 1.

Nel caso della geometria al nadir, l'atmosfera è osservata dall'alto verso il basso. Le misurazioni possono essere in emissione o in assorbimento e il Signal to Noise Ratio (SNR) è limitato dalle piccole differenze che esistono tra le temperature della superficie terrestre e dell'atmosfera.

Nelle geometrie verticali allo zenith, l'atmosfera è osservata, con una linea di vista contraria a quella al nadir e quindi dal basso verso l'alto. Con questo tipo di misurazioni si ambisce ad avere lo stesso tipo di osservazioni che si hanno nel caso precedente. Le differenze significative tra i due tipi di geometria verticale sono che nel caso dello zenith il segnale di background viene dallo spazio e non dalla terra ed inoltre la banda di segnale che origina dagli strati atmosferici più lontani può essere coperta a causa dell'allargamento di quella più vicina. Con il rilevamento allo zenith si ha quindi una migliore differenza di temperatura. Questa tuttavia è relativa alle transizioni deboli, non opache, nella zona vicina che può essere osservata. Tipicamente, nel rilevamento allo zenith l'atmosfera è osservata



Figura A.1: Geometria al lembo in cui sono evidenziate la quota di volo e le quote di tangenza [37].

in una direzione che forma un angolo con lo zenith (secondo la definizione geometrica¹.), detto appunto angolo zenitale, che può variare da 0° a circa 60° . Lo zenith sounding può essere usato sia in emissione che in assorbimento.

Il limb sounding è effettuato da uno strumento posto su una "piattaforma" ad alta quota in atmosfera. Lo strumento (nel nostro caso un satellite) è indicato dal punto chiamato A in figura A.1 mentre H_{max} rappresenta l'altezza di volo dello strumento precedentemente definita in modo improprio come altezza "piattaforma". Questa tipo di osservazione in passato è stata molto usata per i palloni stratosferici che potevano volare fino ad un massimo di 40 Km. Attualmente, invece, per questo tipo di geometria sono predilette le misurazioni da satellite. La linea di vista (in figura A.1 sono riportate tre linee di vista come esempio chiamate ray 1, ray 2 e ray N), che non incontra mai la superficie terrestre, è orientata sotto la direzione orizzontale in modo da consentire di osservare il lembo dell'atmosfera. In questo caso l'angolo zenitale è maggiore di 90°. Il cammino ottico raggiunge una distanza minima dalla superficie terrestre, a causa della sua curvatura, per poi allontanarsi di nuovo verso lo spazio. Il punto più vicino alla terra da cui passa la linea di vista è definito "quota di tangenza", in figura A.1 sono rappresentate tre diverse quote di tangenza chiamate z_1, z_2 e z_N . La lunghezza del cammino ottico alla quota di tangenza e il gradiente di pressione dell'atmosfera di solito fanno sì che lo strato atmosferico a questa quota sia il più contribuente per il segnale osservato. Le osservazioni a diversi angoli zenitali forniscono misure a diverse quote di tangenza che possono essere utili per ricavare la composizione atmosferica in funzione dell'altezza. La risoluzione spettrale per questo tipo di geometria deve essere sufficientemente elevata per consentire di risolvere la linea spettrale di interesse da quelle di altre eventuali specie interferenti. Una buona accuratezza di puntamento è necessaria

¹Punto d'intersezione della sfera celeste con la perpendicolare passante per il luogo di osservazione posto sulla superficie terrestre

per risolvere il contributo dei diversi strati atmosferici. Il limb sounding si può fare sia in emissione che in assorbimento, selezionando le opportune regioni spettrali [38].

Appendice B

Strumenti matematici

B.1 Forward model

La distribuzione spettrale della radianza atmosferica calcolata usando un modello di trasferimento radiativo, ossia una modello diretto (forward model), e una composizione atmosferica assunta è nota come *spettro sintetico*.

Per gli aspetti matematici relativi a questa tesi e alle zone spettrali considerate si possono utilizzare delle approssimazioni sull'atmosfera considerata che andranno a semplificare il problema da affrontare. Nella trattazione del trasferimento radiativo successivamente riportata considereremo infatti un'atmosfera all'equilibrio termodinamico, perfettamente stratificata¹ e non scatterante. Possiamo fare quest'ultima assunzione perché la radiazione infrarossa non è sufficientemente energetica da provocare un fenomeno di scattering significativo.

La radianza spettrale osservata da un'altezza h_f , al numero d'onda σ e all'angolo zenitale Θ è data dalla seguente espressione di trasferimento radiativo:

$$S(\sigma, h_f, \Theta) = B[\sigma, T(s_b)] \cdot \tau(\sigma, s_b) + \int_{\tau(\sigma, s_b)}^{\tau(\sigma, 0)} B[\sigma, T(s)] d\tau(\sigma, s)$$
(B.1.1)

dove *s* è il cammino ottico, che va da 0, al punto di osservazione, fino a *s*_b, al limite atmosferico², *B* [σ , *T* (*s*)] è la radianza di corpo nero al numero d'onda σ e alla temperatura *T*(*s*), τ (σ , *s*) è la trasmittanza dell'atmosfera al numero d'onda σ , calcolata come funzione del cammino ottico.

La trasmittanza dell'atmosfera $\tau(\sigma, s)$ è :

$$\tau(\sigma, s) = e^{\left[-\int_0^s \sum_i k_i(\sigma, p, T)q_i(s)\rho(s)\mathrm{d}s\right]}$$
(B.1.2)

¹considerare un'atmosfera perfettamente stratificata consente di trascurare le dipendenze longitudinali e latitudinali.

²che può essere superiore o inferiore.

dove $k_i(\sigma, p, T)$ è il coefficiente di assorbimento alla pressione p e alla temperatura T, $q_i(s)$ è il VMR e $\rho(s)$ è la densità dell'atmosfera. L'indice *i* è relativo al costituente atmosferico considerato.

La radianza di corpo nero, $B[\sigma, T(s_b)]$, al limite dell'atmosfera è data da diverse sorgenti a seconda del modo di osservazione. Nel caso di osservazioni in emissione la radianza al limite atmosferico è uguale alla radianza dello spazio. Questa radianza è solitamente molto piccola e in molte osservazioni può essere considerata nulla. Per questo, poiché lo strumento ideale in esame effettua misurazioni in emissione, nel proseguo di questa trattazione trascureremo (immaginandolo uguale a zero) il contributo alla radianza proveniente dal limite dell'atmosfera.

Per quanto precedentemente detto l'equazione B.1.1 si semplifica nel seguente modo.

$$S(\sigma, h_f, \Theta) = \int_{\tau(\sigma, s_b)}^{\tau(\sigma, 0)} B[\sigma, T(s)] d\tau(\sigma, s)$$
(B.1.3)

I risultati che otteniamo per questo caso che è il più semplice possibile si possono estendere anche a casi più complessi.

È più semplice studiare la dipendenza della radianza osservata dai profili di volume mixing ratio, cioè $S(q_i(h), \sigma, h_f, \Theta)$, se è usata come variabile di integrazione l'altezza o comunque una variabile direttamente correlata ad essa nell'equazione B.1.3.

Per comodità anzichè usare l'altezza, h, come variabile di integrazione useremo la variabile $z = -\ln p/p_0$, dove p_0 è la pressione al livello del mare mentre p è la pressione all'altezza h. Quindi l'equazione B.1.3 usando z come variabile di integrazione diventa:

$$S(q_i(z), \sigma, h_f, \Theta) = \int_0^\infty B[\sigma, T(z)] W[\sigma, h_f, \Theta, q_i(z), z] dz$$
(B.1.4)

dove $W[\sigma, h_f, \Theta, q_i(z), z]$ è la funzione risultante dal cambio di variabile. Per amore della semplicità possiamo "compattare" ancora di più la formula usando la variabile x al posto delle tre variabili (σ, h_f, Θ) che identificano le condizioni di osservazione. Perciò l'equazione B.1.4 diventa [38]:

$$S(q_i(z), x) = \int_0^\infty B[\sigma, T(z)] W[x, q_i(z), z] dz$$
(B.1.5)

B.2 Retrieval model

Nella sezione precedente è stato affrontato il problema diretto che consiste nel modellare il segnale atmosferico S che raggiunge lo spettrometro in funzione dei parametri osservazionali e dei profili di distribuzione dei target atmosferici. In questa sezione si vuole invece risolvere il problema inverso ossia derivare i profili di distribuzione $q_i(z)$ dei target atmosferici. Poiché il trasferimento radiativo non rappresenta una trasformazione lineare il problema non può essere risolto attraverso l'inversione analitica dell'equazione di trasferimento radiativo.

Si può, tuttavia, ottenere una trasformazione lineare che connette $S(q(z), x) \in q(z)$ operando un'espansione di Taylor dell'equazione di trasferimento radiativo B.1.4, attorno a un profilo assunto $\tilde{q}(z)$. Ipotizzando $\tilde{q}(z)$ sufficientemente vicino al profilo reale per ricadere in un comportamento lineare della funzione S(q(z), x), l'espansione di Taylor può essere troncata al primo termine, ottenendo:

$$S(x,q(z)) = S(x,\tilde{q}(z)) + \int_0^\infty \left[\frac{\partial S(x,q(z))}{\partial q(z)}\right]_{\tilde{q}(z)} [q(z) - \tilde{q}(z)] dz \qquad (B.2.1)$$

Nei casi pratici in cui si ha un numero finito di osservati e un numero finito di profili target (o parametri da modellare) è più conveniente scrivere l'equazione B.2.1 in forma vettoriale³:

$$\mathbf{y} = \mathbf{K}\mathbf{x} \tag{B.2.2}$$

dove y è un vettore che rappresenta gli *m* valori misurati $(S(x, q(z)) - S(x, \tilde{q}(z)))$, differenza tra i valori osservati e i valori simulati), x è un vettore che contiene gli *n* parametri fisici 'sconosciuti' che si vogliono ricavare dalle misurazioni $(q(z) - \tilde{q}(z))$, ogni x_i di x rappresenta la correzione necessaria al valore assunto $\tilde{q}(z)$ per ottenere il valore corretto q(z)) e K è una matrice, che funge da operatore lineare, di dimensioni $(m \times n)$ detta Jacobiana $(\frac{\partial S(x,q(z))}{\partial q(z)})$, ogni elemento della matrice rappresenta la derivata dell'osservato rispetto al target).

L'obiettivo del retrieval è quello di determinare il vettore x:

$$\mathbf{x} = \mathbf{G}\mathbf{y} \tag{B.2.3}$$

dove G è la matrice guadagno (gain matrix). G è un matrice con dimensioni $(n \times m)$ ma è definita diversamente a seconda del caso considerato:

- m = n, numero di misurazioni = numero di incognite
- m > n, numero di misurazioni > numero di incognite
- m < n, numero di misurazioni < numero di incognite

³In questa sezione i vettori e le matrici saranno indicati in **grassetto**.

La prima possibilità è che il numero di incognite sia uguale al numero di misure (n = m). Usando l'equazione B.2.2 si nota che K in questo caso è una matrice quadrata di dimensioni $(n \times n)$. Quindi è possibile invertire la matrice K senza ulteriori manipolazioni, ottenendo la seguente matrice guadagno:

$$\mathbf{G} = \mathbf{K}^{-1} \tag{B.2.4}$$

L'equazione B.2.4 è molto chiara e pulita ma in questa forma implica che ci sia una soluzione esatta. In tutte le misure reali ci sono sorgenti di incertezza (errori) che rendono più complicato il processo e che devono essere considerate nella trattazione perché una misurazione di un parametro fisico non ha alcun significato se non è accompagnata dalla dichiarazione della sua incertezza.

Ogni vettore di osservati y è caratterizzato da una matrice varianza-covarianza S_y :

$$\mathbf{S}_{y} = \begin{bmatrix} \sigma_{1y}^{2} & \sigma_{2y}\sigma_{1y} & \cdots & \sigma_{my}\sigma_{1y} \\ \sigma_{1y}\sigma_{2y} & \sigma_{2y}^{2} & \cdots & \sigma_{my}\sigma_{2y} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{1y}\sigma_{my} & \sigma_{2y}\sigma_{my} & \cdots & \sigma_{my}^{2} \end{bmatrix}$$
(B.2.5)

Questa matrice di dimensioni $(m \times m)$ è sempre simmetrica poiché $\sigma_{iy}\sigma_{jy} = \sigma_{jy}\sigma_{iy}$ ed ha la diagonale sempre positiva perché costituita dai valori della deviazione standard usuale σ_{iy}^2 per il caso di misure non correlate. Questo significa che la matrice varianza-covarianza è sempre invertibile. Le misure fuori diagonale sono covarianze che descrivono il grado di correlazione tra le diverse misurazioni, se due misure non sono correlate la covarianza è zero.

Una volta che conosciamo la varianza-covarianza delle misurazioni possiamo ricavare anche la varianza dei parametri modellati:

$$\mathbf{S}_x = \mathbf{G}\mathbf{S}_y\mathbf{G}^T \tag{B.2.6}$$

L'equazione B.2.5 è generale per tutti i casi. Se si considera la matrice guadagno quadrata, G, la matrice S_x risulta:

$$\mathbf{S}_{x} = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{S}_{y} \left(\mathbf{K}^{-1} \right)^{T}$$
(B.2.7)

La situazione è diversa se si hanno più dati che incognite (m > n), in questo caso si è di fronte al classico problema di fit lineare. Applichiamo quindi il teorema di Gauss per minimizzare l'espressione B.2.2:

$$\chi^{2} = (\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x})^{2} = (\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x})^{T} (\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x})$$
(B.2.8)

La soluzione, ossia il vettore x si ottiene minimizzando la B.2.8, $\frac{\partial \chi^2}{\partial x}$:

$$\mathbf{x} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{K}\right)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{y} = \mathbf{G} \mathbf{y}$$
(B.2.9)

In questo caso $\mathbf{G} = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T$. Questa soluzione molto elegante da vedere è priva degli errori sistematici necessari alle analisi di sistemi fisici. La soluzione della minimizzazione considerando la matrice varianza-covarianza relativa alle misurazioni diventa:

$$\mathbf{x} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}\right)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{y}$$
(B.2.10)

Al contrario di quanto fino ad ora esposto si può avere un numero di misure minore dei parametri da modellare (m < n), questo è il caso più comune nei problemi di retrieval atmosferici. In queste condizioni l'inversione matriciale di solito fallisce, poiché spesso le righe non risultano più linearmente dipendenti. La soluzione di questo problema è la seguente:

$$\mathbf{G} = \mathbf{K}^T \left(\mathbf{K} \mathbf{K}^T \right)^{-1} \tag{B.2.11}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{G}\mathbf{y} = \mathbf{K}^T \left(\mathbf{K}\mathbf{K}^T\right)^{-1} \mathbf{y}$$
(B.2.12)

Questo approccio, tuttavia, non è propriamente ideale poiché solitamente si preferisce avere più misurazioni che incognite. Questo porta ad aver bisogno di includere altre fonti di informazione, chiamate *a-priori* per aggiungere vincoli al fit in modo da ottenere soluzioni fisicamente realistiche e matrici stabili.

B.3 Optimal estimation

In questa sezione considereremo il caso in cui si desideri includere nel fit delle informazioni *a-priori* per condizionare o limitare il fit. Questo caso è applicato molte volte ai retrieval di parameri atmosferici, in cui si ha solo un limitato numero di misure e moltissimi possibili parametri (m < n).

La teoria dell'Optimal Estimation [31] fornisce una forma linearizzata per stimare il vettore \mathbf{x} (relativo ai profili atmosferici) basata sulla combinazione di un set di misurazioni \mathbf{y} e una stima *a-priori* \mathbf{a} dello stato:

$$\mathbf{x} = \mathbf{G}\mathbf{y} + (\mathbf{I} - \mathbf{G}\mathbf{K})\mathbf{a} \tag{B.3.1}$$

dove K è la matrice Jacobiana (o la funzione peso, $K_{jl} = \partial y_j / \partial x_l$) e G è la matrice guadagno data da:

$$\mathbf{G} = \mathbf{S}_{a}\mathbf{K}^{T}\left(\mathbf{S}_{y} + \mathbf{K}\mathbf{S}_{a}\mathbf{K}^{T}\right)^{-1}$$
(B.3.2)

 S_a è la covarianza di a rispetto al vero stato e S_y è la covarianza di y rispetto alla misurazione perfetta che sarebbe ottenuta dal vero stato. L'equazione B.3.2 è una forma dell'equazione B.2.11 che considera gli eventuali errori relativi sia all'*a-priori* che alle misurazioni. L'errore sul retrieval (cioè la matrice varianza-covarianza dello state vector, \mathbf{x}) è dato da:

$$\mathbf{S}_{x} = \mathbf{G}\mathbf{S}_{y}\mathbf{G}^{T} + (\mathbf{I} - \mathbf{G}\mathbf{K})\mathbf{S}_{a}(\mathbf{I} - \mathbf{G}\mathbf{K})^{T}$$
(B.3.3)

$$= \mathbf{S}_{a} - \mathbf{S}_{a} \mathbf{K}^{T} \left(\mathbf{S}_{y} + \mathbf{K} \mathbf{S}_{a} \mathbf{K}^{T} \right)^{-1} \mathbf{K} \mathbf{S}_{a}$$
(B.3.4)

$$= (\mathbf{I} - \mathbf{G}\mathbf{K})\,\mathbf{S}_a \tag{B.3.5}$$

Per un set di *m* misure, l'equazione B.3.2 richiede l'inversione di una matrice di dimensioni $m \times m$, che diventa una strada non percorribile se *m* è molto grande.

Se S_y può essere invertito semplicemente per conto suo è più conveniente usare questa riformulazione dell'equazione B.3.2:

$$\mathbf{G} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1}\right)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1}$$
(B.3.6)

Tuttavia, se S_y è diagonale e quindi gli errori sulle misurazioni sono scorrelati le equazioni dalla B.3.1 alla B.3.5 possono essere applicate alla misurazione individuale y_j sequenzialmente:

$$\mathbf{x}^{j} = \mathbf{g}^{j} y_{j} + \left(\mathbf{I} - \mathbf{g}^{j} \mathbf{k}_{j}^{T}\right) \mathbf{a}^{j}$$
(B.3.7)

$$\mathbf{g}^{j} = \mathbf{S}_{a}^{j} \mathbf{k}_{j} \left(\sigma_{j}^{2} + \mathbf{k}_{j}^{T} \mathbf{S}_{a}^{j} \mathbf{k}_{j} \right)^{-1}$$
(B.3.8)

$$\mathbf{S}_{x}^{j} = \left(\mathbf{I} - \mathbf{g}^{j}\mathbf{k}_{j}^{T}\right)\mathbf{S}_{a}^{j} \tag{B.3.9}$$

dove \mathbf{k}_j^T è la riga della matrice Jacobiana associata a y_i ; l'apice j denota una quantità che è progressivamente incrementata in funzione della misurazione considerata, $j = 0 \dots m$ e \mathbf{a}^j , $\mathbf{S}_a^j \equiv \mathbf{x}^{j-1}$, \mathbf{S}_x^{j-1} .

Le informazioni *a-priori* indipendenti originali sono usate per settare \mathbf{a}^1 , \mathbf{S}^1_a ma nelle successive iterazioni la stima dell'*a-priori* ingloba anche le informazioni contenute nelle precedenti misurazioni. In questo modo si è riusciti a spacchettare l'inversione di una matrice $m \times m$ (equazione B.3.2) in m inversioni di una quantità scalare (equazione B.3.8). C'è anche la possibilità di applicare questa stima sequenziale a subset di y più grandi ma da un punto di vista dei tempi di calcolo è più sconveniente. Rimpiazzare la varianza σ_j^2 con l'equivalente subset della matrice varianza-covarianza \mathbf{S}_y consente di considerare le correlazioni tra gli errori di ogni subset.

In realtà la matrice varianza-covarianza S_y rappresenta non solo la varianza S_{ϵ} della differenza tra le misurazioni reali e perfette ma anche la covarianza S_f della differenza tra il forward model (sezione B.1) calcolato nel retrieval e i processi fisici di trasferimento radiatiavo:

$$\mathbf{S}_y = \mathbf{S}_\epsilon + \mathbf{S}_f \tag{B.3.10}$$

Mentre la componente dell'errore sulla misurazione può essere dominata dal rumore casuale (S_{ϵ} è circa diagonale), gli errori relativi al forward model, per esempio gli effetti che può avere sottostimare un contaminante, tendono ad essere correlati. Per convenienza, S_{ϵ} sarà usato solo per riferirsi alla componente random o localmente correlata dell'errore sulla misurazione mentre le componenti dell'errore che risultano ampiamente correlate saranno considerate parte di S_{f} .

Oltre agli errori random, un set di *m* misurazioni y conterrà anche componenti dell'errore ∂y^i dovute alle diverse fonti di errore *i*. L'ampiezza del vettore di errori ∂y^i corrisponde a una perturbazione pari a 1σ della fonte di errore, e la forma è caratteristica della particolare sorgente di errore. Assumendo che tutti questi errori siano tra loro indipendenti, l'errore di covarianza totale (equazione B.3.10) di y diventa:

$$\mathbf{S}_{y}^{tot} = \mathbf{S}_{y}^{rnd} + \sum_{i} E\{\left(\partial \mathbf{y}^{i}\right) \left(\partial \mathbf{y}^{i}\right)^{T}\}$$
(B.3.11)

$$=\mathbf{S}_{y}^{rnd} + \sum_{i} \mathbf{S}_{y}^{i} \tag{B.3.12}$$

dove $E\{\dots\}$ rappresenta il valore previsto e $\mathbf{S}_{y}^{rnd} \equiv \mathbf{S}_{\epsilon}$ per quanto precedentemente detto. In pratica ogni vettore $\partial \mathbf{y}^{i}$ può essere calcolato come la differenza tra il set di misure nominali e un set in cui la fonte di errore è perturbata di 1σ , e la covarianza corrispondente è data direttamente da $(\partial \mathbf{y}^{i}) (\partial \mathbf{y}^{i})^{T}$. Così le informazioni di correlazione totali di dimensioni $m \times m$ possono essere decomposte in un set di vettori di errore $\partial \mathbf{y}^{i}$, ciascuno di lunghezza m.

L'equazione B.3.1 rappresenta la mappatura del vettore di misurazioni nel retrieval, così i vettori con gli errori di misurazione ∂y^i saranno mappati nei corrispondenti vettori relativi agli errori di retrieval ∂x^i nello stesso modo:

$$\partial \mathbf{x}^{i} = \mathbf{G} \partial \mathbf{y}^{i} + (\mathbf{I} - \mathbf{G}\mathbf{K}) \partial \mathbf{a}^{i}$$
 (B.3.13)

dove $\partial \mathbf{a}^i$ tiene conto di ogni componente relativa agli errori sistematici rispetto allo stato *a-priori* stimato.

La covarianza totale sul retrieval è quindi data da:

$$\mathbf{S}_x^{tot} = \mathbf{S}_x^{rnd} + \mathbf{S}_x^{sys} \tag{B.3.14}$$

dove:

$$\mathbf{S}_{x}^{rnd} = (\mathbf{I} - \mathbf{G}\mathbf{K})\,\mathbf{S}_{a}^{rnd} \tag{B.3.15}$$

$$\mathbf{S}_{x}^{sys} = \sum_{i} E\{\left(\partial \mathbf{x}^{i}\right) \left(\partial \mathbf{x}^{i}\right)^{T}\} \equiv \sum_{i} \mathbf{S}_{x}^{i}$$
(B.3.16)

La stessa covarianza totale può essere ottenuta se tutte le misure sono incorporate simultaneamente con la matrice covarianza completa S_y nell'equazione B.3.3, aggiungendo il termine $\mathbf{GS}_f \mathbf{G}^T$, ma il vantaggio di propagare gli errori sistematici come un set di vettori piuttosto che come matrice covarianza è che non si avrà perdita di informazione se sarà applicata una stima sequenziale.

B.3.1 Information gain

Per confrontare le covarianze è necessario definire una quantità scalare, la figura di merito [31], per il retrieval. La figura di merito valuta il guadagno nel contenuto di informazione (information gain) che un selezionato intervallo spettrale apporta al retrieval.

Ci sono diversi modi per valutare questo parametro, tuttavia, uno dei più usati (nonchè quello adottato nella selezione delle microwindows affrontata nel capitolo 4.1) è il contenuto di informazione di Shannon. Il contenuto di informazione H, misurato in bits, è definito come segue:

$$H = -\log_2 \frac{F_x}{F_a} \tag{B.3.17}$$

dove $F_x = |\mathbf{S}_x^{tot}|$, è il determinante della covarianza del retrieval, $F_a = |\mathbf{S}_a^{tot}|$, è il determinante della covarianza dell'informazione *a-priori*.

Se il retrieval è effettuato rispetto a un combinazione sequenziale di j misurazioni allora si deve considerare l'incremento ΔH_j rispetto ad ogni misura considerata:

$$\Delta H_j = -\log_2 \frac{F_j}{F_{j-1}} \tag{B.3.18}$$

dove F_j e F_{j-1} sono i determinanti della covarianza per il retrieval prima e dopo che la misurazione j sia stata aggiunta, quindi $F_0 \equiv F_a$.

B.3.2 Selezione di misure individuali usando il retrieval model

Avendo stabilito un background teorico, si può vagliare nel dettaglio la procedura per selezionare misurazioni individuali in un retrieval.

Primo, i vettori errore ∂y^i sono precalcolati per ogni fonte di errore *i* rilevante nell'intero dominio di misura. Sono, inoltre, necessarie le Jacobiane k^T per ciascuna misura: ognuna è un vettore riga di lunghezza combaciante con il numero di parametri di retrieval (i parametri di retrieval sono all'interno di un vettore definito "vettore di stato del retrieval", x). Si stabilisce un'opportuna matrice covarianza per l'informazione *a-priori* S_a , che corrisponde all'incertezza relativa ad ogni eventuale iniziale conoscenza *a-priori* degli elementi di x da ricavare, come ad esempio la covarianza di un modello numerico o le incertezze climatologiche. Per i retrieval che non usano un'esplicita informazione *a-priori* gli elementi diagonali di S_a possono essere settati a valori che sono maggiori rispetto a quelli che ci aspettiamo dall'accuratezza di retrieval. Assumendo che la stima *a-priori* non contenga correlazioni con gli errori di misurazione, ∂a_i può essere inizializzato pari a zero per ogni fonte di errore. Poi, per ogni misura y, si calcola la versione scalare delle equazioni B.3.13 e B.3.14:

$$\mathbf{g} = \mathbf{S}_{a}^{rnd} \mathbf{k} \left(\sigma_{y}^{2} + \mathbf{k}^{T} \mathbf{S}_{a}^{rnd} \mathbf{k} \right)^{-1}, \qquad (B.3.19)$$

$$\mathbf{S}_{x}^{rnd} = \left(\mathbf{I} - \mathbf{g}\mathbf{k}^{T}\right)\mathbf{S}_{a}^{rnd},\tag{B.3.20}$$

$$\partial \mathbf{x}^{i} = \mathbf{g} \partial y^{i} + (\mathbf{I} - \mathbf{g} \mathbf{k}^{T}) \partial \mathbf{a}^{i},$$
 (B.3.21)

$$\mathbf{S}_{x}^{tot} = \mathbf{S}_{x}^{rnd} + \sum_{i} \left(\partial \mathbf{x}^{i}\right) \left(\partial \mathbf{x}^{i}\right)^{T}.$$
(B.3.22)

Qui si è assunto che i pesi delle misure di retrieval siano in accordo alla varianza del rumore σ_y^2 . È da notare che la matrice guadagno g per una singola misura è un vettore colonna, e la quantità inversa è uno scalare, così le operazioni sovrastanti possono essere effettuate rapidamente per un grande numero di misurazioni, ammesso che ∂y^i e \mathbf{k}^T siano facilmente ottenibili.

La figura di merito è calcolata per ogni misura e quella con la migliore è poi selezionata. I valori di \mathbf{S}_x^{rnd} , $\partial \mathbf{x}^i$ sono copiati in \mathbf{S}_a^{rnd} , $\partial \mathbf{a}^i$ (come in una stima sequenziale) così che il retrieval incorporando la miglior misurazione mantenga memoria della precedente stima per scegliere la seconda misura.

Questo processo sarà ripetuto finchè non saranno selezionate tante misure quante quelle richieste o finchè l'aggiunta di ulteriori misure riduce il valore della figura di merito.

B.3.3 Risoluzione spaziale

Per valutare la risoluzione verticale e orizzontale dei parametri di retrieval si sfrutta la matrice detta averaging kernel (A = GK) che ha la seguente definizione:

$$\mathbf{A} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1}\right)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}$$
(B.3.23)

Se si esegue un'analisi di retrieval 2-D si sfrutta una griglia bidimensionale⁴ in cui ciascun punto della griglia k è definito dalla sua altezza z_k e dalla sua coordinata orbitale (OC)⁵, θ_k . L'averaging kernel bidimensionale associato al parametro k è il vettore a (k, j), con $j = 0 \cdots p$ (dove p è il numero di punti della griglia), che corrisponde alla riga k della matrice A. La risoluzione verticale dei parametri di retrieval è definita come l'ampiezza a metà altezza della "transizione" a forma di campana identificata dal set di elementi del vettore a che corrispondono al valore di θ_k della OC. In modo analogo la risoluzione orizzontale è definita come l'ampiezza a metà altezza del set di elementi a che corrisponde all'altezza z_k .

⁴per le differenze tra l'approccio 1-D e 2-D si veda la sezione 4.2.1 del capitolo 4.

⁵La OC è definita come l'angolo polare che ha origine al punto più a nord dell'orbita e che attraversa l'orbita lungo la sua estensione di 360°.

B.4 Information Load

Per un'analisi di Geo-fit [32] (basata sulla matematica precedentemente vista) di osservazioni a scansione al lembo l'atmosfera è partizionata sia verticalmente che orizzontalmente, il che significa un aumento dei livelli di altezza consecutivi e di raggi verticali. Questa discretizzazione porta a una rappresentazione a ragnatela in cui il punto definito dell'attraversamento di un livello con un raggio è chiamato "nodo" e la figura piana delimitata da livelli e raggi consecutivi è chiamata "spicchio". La figura B.1 mostra un esempio di discretizzazione 2-D con uno spicchio sottolineato in verde. Con uno strumento che funziona con la scansione al lembo le misurazioni sono ripetute continuamente lungo la traccia dell'orbita. Da questo segue che, come illustato in figura B.1, la linea di vista di diverse geometrie di osservazione può attraversare uno specifico spicchio nella discretizzazione at-



Figura B.1: Discretizzazione 2D dell'atmosfera. Uno spicchio, rappresentato in verde, è attraversato da tre diverse linee di vista.

mosferica.

Se si considera l'analisi simultanea di tutte le geometrie di osservazione, si può assegnare allo spicchio h il quantificatore scalare chiamato *information load* [39] (carico di informazione, Ω) rispetto al parametro geofisico, q. Ω è definito come segue:

$$\Omega(q,h) = \left[\sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial S_{ijk}}{\partial q_{ijk}}\right)^{2}\right]$$
(B.4.1)

dove $\Omega(q, h)$ è il carico di informazione complessivo dello spicchio h rispetto al parametro atmosferico q, S_{ijk} è il segnale spettrale della geometria di osservazione i alla frequenza j della microwindow k analizzata, l è il numero di geometrie di osservazione che definisce la moltepicità⁶ dello spicchio h, m è il numero di microwindows analizzate nella geometria di

⁶La molteplicità è definita dal numero di linee di vista che attraversano uno spicchio. Se uno spicchio è attraversato da 8 linee di vista avrà molteplicità 8.

osservazione i ed n è il numero di punti spettrali della microwindow j.

 Ω definito nell'equazione **B.4.1** può essere scritto anche nel seguente modo:

$$\Omega\left(q,h\right) = \left[\left(\mathbf{K}^{T}\mathbf{K}\right)_{h}\right]^{\frac{1}{2}}$$
(B.4.2)

dove K è la matrice Jacobiana dello spicchio *h*. L'equazione B.4.2 è valida solo se gli osservati sono scorrelati, caratterizzati da $S_y = I$ e i vincoli sono trascurati.

Perciò, in un'analisi di retrieval in cui si vuole determinare il valore del target q nello spicchio h l'incertezza sul retrieval sarà data da $1/\Omega$.

L'equazione B.4.1 implica che il valore di Ω sia principalmente determinato da: le geometrie di osservazione, l'atmosfera assunta per il parametro analizzato e il set di microwindows selezionato per l'analisi. È, perciò, facile immaginare che diversi target mostreranno diverse distribuzioni di Ω perché soltanto il primo parametro da cui è determinata non dipende dalle proprità del target. Se le osservazioni sono affette da diversi livelli di rumore spettrale è più opportuno utilizzare l'information load pesato ($W\Omega$) definito come segue:

$$W\Omega\left(q,h\right) = \left[\left(\mathbf{K}^{T}\mathbf{S}_{y}^{-1}\mathbf{K}\right)_{h}\right]^{\frac{1}{2}}$$
(B.4.3)

dove S_y è la matrice varianza-covarianza delle osservazioni relative a tutti i punti spettrali che compongono lo spicchio *h*.

L'analisi di information load è utile per predire le performance del retrieval corrispondente.

Appendice C

Informazioni supplementari

In questa appendice sono riportate tutte le immagini e le tabelle che aiutano a capire i concetti esposti nel capitolo 5 ma che sarebbero state ridondanti.

C.1 MWs selezionate considerando gli errori strumentali

MW	Numero d	da [cm ⁻¹]	Quo	ota	[Km]	Inf. gain [bit]		
1	163.260	-	163.724	6	-	68	149.34	
2	175.760	-	176.256	6	-	68	41.95	
3	170.244	-	170.740	6	-	68	11.12	
4	106.132	-	106.504	9	-	68	8.20	
5	94.772	-	95.016	18	-	68	4.14	
6	161.128	-	161.624	6	-	68	3.83	
7	156.048	-	156.544	9	-	68	3.13	
8	172.980	-	173.476	6	-	60	2.56	
9	119.520	-	120.020	9	-	60	1.84	
10	169.076	-	169.572	6	-	68	1.44	
11	177.156	-	177.656	6	-	60	1.10	
12	150.276	-	150.776	9	-	68	0.60	
13	163.732	-	164.228	6	-	60	0.27	
				Totale		ıle	230	

Le tre tabelle seguenti sono relative ai set di MWs isolate considerando anche gli errori strumentali nel vettore relativo agli errori sistematici y (equazione B.3.11).

 Tabella C.1:
 Elenco delle MWs ottimizzate per il retrieval di PTH considerando gli errori strumentali.

	13 847.344 - 847.608	12 933.692 - 933.876	11 828.692 - 828.876	10 730.844 - 730.884	9 718.908 - 719.088	8 940.788 - 941.284	7 825.136 - 825.264	6 698.792 - 698.996	5 812.388 - 812.544	4 700.928 - 701.108	3 948.048 - 948.288	2 810.896 - 811.072	1 705.800 - 705.984	MW Numero d'onda $[cm^{-1}]$	INTIMES CO2 COIL a - p
Totale	6 - 68	6 - 60	6 - 68	6 - 60	6 - 68	6 - 68	6 - 68	6 - 68	6 - 68	6 - 68	6 - 68	6 - 68	6 - 68	Quota [Km]	vriori Cl.
42	0.02	0.41	0.10	0.35	0.28	0.90	0.89	1.00	1.38	2.92	3.64	10.48	19.28	Inf. gain [bit]	
	847.340 - 847.608	933.692 - 933.876	828.692 - 828.876	688.084 - 688.264	730.844 - 730.880	948.040 - 948.284	718.912 - 719.088	812.388 - 812.544	825.128 - 825.264	700.928 - 701.108	940.792 - 941.288	705.800 - 705.980	810.900 - 811.072	Numero d'onda $[cm^{-1}]$	
Totale	6 - 68	6 - 60	6 - 68	9 - 60	6 - 60	6 - 68	9 - 68	6 - 68	6 - 68	9 - 68	6 - 68	18 - 60	6 - 60	Quota [Km]	
49	0.01	0.40	0.06	0.12	0.18	0.35	0.79	1.58	1.34	1.67	2.50	4.98	34.59	Inf. gain [bit	" PILOIL

un'informazione a-priori climatologica mentre a destra utilizzando quella proveniente da una MWs del FIR. Tabella C.2: Database delle MWs ottimizzate per il retrieval di CO₂ considerando gli errori strumentali. A sinistra sono riportate le MWs selezionate utilizzando

C.2 Information Load delle MWs ottimizzate per PTH

 Ω può essere calcolato per ogni parametro del retrieval, successivamente sono riportati i valori medi a tutte le quote dei $\widetilde{W\Omega}$ delle 14 MWs ottimizzate per il retrieval di PTH nel FIR per il parametro T. Si riportano i grafici di questo parametro perché è il più critico per un retrieval accurato della CO₂. Non sono riportati gli $\widetilde{W\Omega}$ per le singole MWs per la CO₂ perché sono analoghi a questi, ovviamente con forme e intensità diverse.



Figura C.1: Profili di $W\Omega$ medio per le MWs da 1 a 4 i cui estremi sono riportati nella tabella 5.1.



Figura C.2: Profili di $W\Omega$ medio per le MWs da 5 a 10 i cui estremi sono riportati nella tabella 5.1.



Figura C.3: Profili di $W\Omega$ medio per le MWs da 11 a 14 i cui estremi sono riportati nella tabella 5.1.

C.3 Microwindows selezionate per l'analisi

Nel capitolo 5 l'immagine 5.1 è riportata in scala logaritmica per far apprezzare tutte le molecole inquinanti presenti in questa regione che sono considerate nel vettore y (equazione B.3.11). Tuttavia in questa sezione dell'appendice saranno riportate le microwindows relative al PTH, scelte per l'analisi di retrieval, in scala non logaritmica perché sono più rappresentative per capire quali sono le molecole principali nella regione d'indagine. Deve essere chiaro però che la situazione rappresentata nella figura 5.1 del capitolo 5 è valida per tutte le MWs successivamente riportate. Infatti nella legenda di ogni immagine sono state volutamente lasciate anche le molecole che non si possono apprezzare con la scala utilizzata, perché le loro transizioni anche se non sono visibili ci sono e contribuiscono anche se in un quantitativo trascurabile alla radianza totale rilevata.

Al contrario per quanto riguarda le MWs ottimizzate per la CO_2 si è deciso di riportarle in scala logaritmica perché la scala della radianza non logaritmica sarebbe troppo espansa e farebbe perdere anche dei dettagli che non sono trascurabili a causa della grande intensità delle transizioni della CO_2 . Anche in questo caso sono riportate solo le MWs scelte per l'analisi su osservati simulati.



Figura C.4: MW 1 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza.



Figura C.5: MW 2 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza.



Figura C.7: MW 7 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza.



Figura C.8: MW 10 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza.



Figura C.6: MW 6 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza.



Figura C.9: MW 13 ottimizzata per PTH a 30 Km di quota di tangenza.



Figura C.10: MW 1 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota.



Figura C.11: MW 2 ottimizzata per CO₂ a 30 Km di quota.



Figura C.12: MW 3 ottimizzata per CO₂ a 30 Km di quota.



Figura C.13: MW 5 ottimizzata per CO₂ a 30 Km di quota.



Figura C.14: MW 6 ottimizzata per CO₂ a 30 Km di quota.



Figura C.15: MW 7 ottimizzata per CO_2 a 30 Km di quota.



Figura C.16: MW 8 ottimizzata per CO₂ a 30 Km di quota.



Figura C.17: MW 9 ottimizzata per CO₂ a 30 Km di quota.



Figura C.18: MW 11 ottimizzata per CO₂ a 30 Km di quota.

C.4 Retrieval in cascata su osservati simulati

In questa sezione sono riportate le mappe degli errori medi riportati nelle figure della sezione 5.3.1.



Figura C.19: Mappe dei test sul retrieval di PTH per la T con diverse griglie orizzontali.



(c) step di 3°

Figura C.20: Mappe dei test sul retrieval di PTH per la P con diverse griglie orizzontali.



Figura C.21: Mappe dei test sul retrieval di PTH per l'H₂O con diverse griglie orizzontali.


(c) step di 4°





Figura C.23: Mappe dei prove effettuate per testare l'effetto dei target del retrieval di PTH sul retrieval della CO_2 .

C.5 Multi-Target Retrieval (MTR) su osservati simulati

In questa sezione sono riportate le mappe degli errori che nella sezione 5.3.2 sono rappresentati come errore medio.



Figura C.24: Mappe dei test sul retrieval in MTR per la T con diverse griglie orizzontali.



Figura C.25: Mappe dei test sul retrieval in MTR per la CO₂ con diverse griglie orizzontali.



Figura C.26: Mappe dell'errore assoluto per il retrieval effettuato usando solo le MWs ottimizzate per la CO₂ nella regione del TIR. In C.26(a) e C.26(d) i target del retrieval sono T, P, H₂O e CO₂ mentre in C.26(b) e C.26(c) i target sono T, P e CO₂.

Bibliografia

- [1] US National Research Council, Advancing the Science of Climate Change, 2010.
- [2] Ch.D. Keeling, *Rewards and penalties of monitoring the earth*, Ann. Rev. Energy Environm., 23, 25-82, 1998.
- [3] P. Forster, V. Ramaswamy, P. Artaxo, T. Berntsen, R. Betts, D.W. Fahey, J. Haywood, J. Lean, D.C. Lowe, G. Myhre, J. Nganga, R. Prinn, G. Raga, M. Schulz and R. Van Dorland, 2007: Changes in Atmospheric Constituents and in radiative Forcing. *In: Climate Change 2007: The physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fouth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change* [S. Solomon, D. Qin, M. Manning, Z. Chen, M. Maruis, K.B. Averyt, M. Tignor and H.L. Miller (eds.)]. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA
- [4] Pieter Tans, NOAA ESRL. http://www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/ trends/.
- [5] F.W. Taylor, *Elementary Climate Physics*, Oxford University Press, Oxford, UK, 2005.
- [6] IPCC, 2013: Climate Change 2013: The physical Science Basis. Contribution of Working group I to the Fifth Assessmente Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [T.F. Stocker, D. Qin, G.K. Plattner, M.M.B. Tignor, S.K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex, P.M. Midgley]. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.
- [7] J.G. Canadell, P. Ciais, S. Dhakal, H. Dolman, P. Friedlingstein, K.R. Gurney, A. Held, R.B. Jackson, C. Quéré, E.L. Malone, D.S. Ojima, A.Patwardhan, G.P. Peters, M.R. Raupach: *Interactions of the carbon cycle, human activity, and climate system: a research portfolio*, Curr. Opin. Environ. Sustainabil., 2, 301-311, 2010.

- [8] A.P. Ballantyne, C.B. Alden, J.B. Miller, P.P. Tans and J.W.C. White, *Increase in observed net carbon dioxide uptake by land and oceans during the past 50 years*, Nature, 2012, vol. 488, 70-72
- [9] R.L. Shia, M.C. Liang, C.E. Miller, Y.L. Yung: *CO*₂ in the upper troposphere: Influence of statospheretroposphere exchange, Geophys. Res. Lett., 33, L1481, 2006
- [10] R. Plumb, M. Ko: Interrelationships between mixing ratios of long-lived stratosphere constituens, J. Geophys. Res., 97, 10145-10156, 1992
- [11] R. Plumb: A "tropical pipe" model of stratospheric transport, J. Geophys. Res., 301, 3957-3972, 1996
- [12] H. Bönisch, P. Hoor, C. Gurk, W. Feng, M. Chipperfield, A. Engel, B. Bregman: *Model evaluation of CO₂ and SF₆ in the ectratropical UT/LS region*, J. Geophys. Res., 113, D06101, 2008
- [13] A. Chédin, N.A. Scott, C. Crevoisier, R. Armante: First global measurement of midtropospheric CO₂ from NOAA polar satellites: the tropical zone, J. Geophys. Res., 108, 4581, 2003a
- [14] C. Crevoiser, S. Heilliette, A. Chédin, S. Serrar, R. Armante, N.A. Scott: *Midtropospheric CO₂ concentration retrieval from AIRS observations in the tropics*, Geophys. Res. Lett., 31, L17106, 2004
- [15] C. Crevoisier, A. Cheédin, N.A. Scott, H. Matsueda, T. Machida, R. Armante: First year of upper tropospheric integrated content of CO₂ from IASI hyperspectral infrared observations, Atmos. Chem. Phys., 9, 4797-4810, 2009
- [16] S.S. Kulawik, D.B.A. Jones, R. Nassar, F.W. Irion, J.R. Worden, K.W. Bowman, T. Machida, H. Matsueda, Y. Sawa, S.C. Biraud, M.L. Fischer, A.R. Jacobson: *Characterization of Tropospheric Emission Spectrometer (TES) CO₂ for carbon cycle science*, Atmos. Chem. Phys., 10(12), 5601-5623, 2010
- [17] M. Buchwitz, R. De Beek, S. Noel, J.P. Borrowsandi, H. Bovensmann, H. Bremer, P. Bergamaschi, S. Krner, M. Heimann: *Carbon monoxide, methane and carbon dioxide columns retrieved from SCHIAMACHY by WFM-DOAS: year 2003 initial data set*, Atmos. Chem. Phys., 5, 3313-3329, 2005
- [18] Kuze, A., H. Suto, M. Nakajima, T. Hamazaki: Initial Onboard Performance of TANSO-FTS on GOSAT, in Fourier Transform Spectroscopy, OSA Technical Digest, Optical Society of America, 2009

- [19] H. Boesch, D. Baker, B. Connor, D. Crisp, C. Miller: Global characterization of CO₂ column retrievals from shortwave-infrared satellite observations of the orbiting carbon observatory-2 mission, Remote Sens., 3, 270-304, 2011.
- [20] B. Anderson, G. Gregory, J.J. Collins, G. Sachse, T. Conway, G. Whiting: Airborne observations of spatial and temporal variability of tropospheric carbon dioxide, J. Geophys. Res., 101, 1985-1997, 1996.
- [21] H. Matsueda, S. Taguchi, H.Y. Inoue, M. Ishii: A large impact of tropical biomass burning on CO and CO₂ in the upper troposphere, Science China Press, 45, 116-125, 2002
- [22] S.R. Beagley, C.D. Boone, V.I. Fomichev, J.J. Jin, K. Semeniuk, J.C. McConnel, P.F. Bernath: First multi-year occultation observations of CO₂ in the MLT by ACE satellite: observations and analysis using extended CMAM, Atmos. Chem. Phys., 10, 1133-1153, 2010
- [23] J.T. Emmert, M.H. Stevens, P.F. Bernath, D.P. Drob, C.D. Boone: Observations of increasing carbon dioxide concentration in Earth's thermosphere, NAt. Geosci., 5, 868-871, 2012
- [24] H. Fischer, M. Birk, C. Blom, B. Carli, M. Carlotti, T. von Clarmann, L. Delbouille, A. Dudhia, D. Ehhalt, M. Endemann, J.M. Flaud, R. Gessner, A. Kleinert, R. Koopman, J. Langen, M. López-Puertas, P. Mosner, H. Nett, H. Oelhaf, G. Perron, J. Remedios, M. Ridolfi, G. Stiller, R. Zander: *MIPAS: an instrument for atmospheric and climate research*, Atmos. Chem. Phys., 8, 2151-2188, 2008
- [25] J. Gille, J. Barnett, P. Arter, M. Barker, P. Bernath, C. Boone, C. Cavanaugh, J. Chow, M. Coffey, J. Craft, C. Craig, M. Dials, V. Dean, T. Eden, D.P. Edwards, G. Francis, C. Halvorson, L. Harvey, C. Hepplewhite, R. Khosravi, D. Kinnison, C. Krinsky, A. Lambert, H. Lee, L. Lyjak, J. Loh, W. Mankin, S. Massie, J. McInerney, J. Moorhouse, B. Nardi, D. Packman, C. Randall, J. Reburn, W. Rudolf, M. Schwartz, J. Serafin, K. Stone, B. Torpy, K. Walker, A. Waterfall, R. Watkins, J. Whitney, D. Woodard, G. Young: *High Resolution Dynamics Limb Sounder: experiment overview, recovery and validation of initial temperature data*, J. GEophys. Res., 113, D16S43, 2008.
- [26] P.Y. Foucher, A. Chédin, G. Dufour, V. Capelle, C.D. Boone, P. Bernath: Technical Note: Feasibility of CO₂ profile retrieval from limb viewing solar occultation made by the ACE-FTS instrument, Atmos. Chem. Phys., 9, 2873-2890, 2009

- [27] P.Y. Foucher, A. Chédin, R. Armante, C.D. Boone, C. Crevoisier, P. Bernath: Carbon dioxide atmospheric vertical profiles retrieved from space observation using ACE-FTS solar occultation instrument, Atmos. Chem. Phys., 11, 2455-2470, 2011
- [28] G. Bianchini, U. Cortesi, L. Palchetti, E. Pascale: *SAFIRE-A* (spectroscopy of the atmosphere by far-infrared emission-airborne): optimized instrument configuration and new assessment of improved performance, Appl. Opt. 43(14), 2962-2977, 2004.
- [29] S. Kraft, J. Caron, J.L. Bézy, R. Meynart, J. Langen, B.C. Dominguez, P. Bensi, P. Silvestrin: *PREMIER's Imaging IR Limb Sounder*, SPIE, 10/2011, DOI: 10.1117/12.898328.
- [30] http://www.atm.ox.ac.uk/RFM/
- [31] A. Dudhia, V.L. Jay, C. Rodgers: *Microwindow selection for high-spectral-resolution sounders*, Appl. Opt., 41(18), 3665-3673, 2002.
- [32] M. Carlotti, B.M. Dinelli, P. Raspollini, M. Ridolfi: *Geo-fit approach to the analysis of the limb-scanning satellite measurements*, Appl. Opt., 40(12), 1872-7885, 2001.
- [33] M. Carlotti, G. Brizzi, E. Papandrea, M. Prevedelli, M. Ridolfi, B.M. Dinelli, L. Magnani GMTR: Two-dimensional geo-fit multitarget retrieval model for Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding/Environmental Satellite observations, Appl. Opt., 45(4), 716-727, 2006
- [34] J.J. Remedios: Extreme Atmospheric Constituent Profiles for MIPAS in Proceedings of the european symposium on atmospheric measurements from space, ed. (ESA publication division, 1999), pp 779-783.
- [35] https://www.cfa.harvard.edu/hitran/
- [36] eodg.atm.ox.ac.uk/eodg/project/mipas/documents/ PO-MA-OXF-GS-0019.pdf
- [37] A.K. Majumdar, R.T. Menzies, S.L. Jain: Stratospheric trace constituent profile retrievals using laser heterodyne radiometer IR limb sensing spectra, Appl. Opt., 20, 505-513, 1981
- [38] B.Carli, M. Carlotti: Far-infrared and microwave spectroscopy of the Earth's atmosphere, in Spectroscopy of the Earth's Atmosphere and the Interstellar Medium (Eds. K Narahari Raom and A Weber). Academic Press, 1992
- [39] M.Carlotti, L. Magnani: *Two-dimensional sensitivity analysis of MIPAS observations*, Opt. Express, 17(7), 5340-5357, 2009.

Ringraziamenti

Fin da ultimo sono stata indecisa sul mettere o meno questa pagina. Ho sempre reputato i ringraziamenti un in più . Alla fine le persone importanti sanno già il loro peso specifico nella tua vita ma è pur sempre vero che ogni tanto hanno bisogno di qualche gratificazione. Quindi, per primi, mi sento di ringraziare i miei genitori per i sacrifici che hanno fatto per farmi arrivare fino a qui ma ancor di più per aver sopportato, non sempre in silenzio, i miei cattivi umori soprattutto in quest'ultimo periodo. Restando nell'ambiente famigliare voglio fare un ringraziamento particolare al mio nonno che fin da piccola mi ha fatto apprezzare e capire quanto importante sia la cultura. Mi ha sempre raccontato di quanto gli piacesse andare a scuola e del rammarico enorme che ha provato quando l'ha dovuta lasciare per l'inizio della seconda guerra mondiale. Molto probabilmente è anche grazie a te nonno, se sono arrivata fin qui.

Sono dovuti (e forse sotto sotto meritati) i ringraziamenti anche al mio attuale ragazzo, Danilo, che è nella mia vita da "quasi solo due anni" ma con il quale ho condiviso tanti bei momenti e tanti litigi. In questi due anni ci siamo trainati a vicenda in svariati esami ed è bello riuscire a condividere insieme l'ultimo importantissimo traguardo.

Devo ringraziare tantissimo anche il mio relatore, il prof. Massimo Carlotti, che mi ha insegnato a programmare e aiutata a capire i concetti fisici alla base di questa tesi. Tuttavia mi ha, anche, "aiutata" moralmente in momenti di particolare crisi emotiva e interiore. Mi sento di aggiungere tra i ringraziamenti anche la dott.ssa Elisabetta Cané che è diventata il mio punto di riferimento morale, dal tirocinio della laurea triennale, all'interno del dipartimento.

Grazie al mio relatore ho conosciuto persone splendide presso l'Università di Oxford che mi hanno fatto passare 3 mesi, non troppo semplici, in serenità. Tra questi ringrazio soprattutto il mio tutor Anu Dudhia, il quale non solo mi ha insegnato la fisica ma "mi ha fatto vivere" gli aspetti folcloristici di Oxford e dintorni.

Per ultimi, ma non per importanza, ringrazio tutti i miei amici, sia i nuovi che i vecchi. Non li nomino tutti perché chi davvero conta per me lo sa.

Mi sento di ringraziare, inoltre, anche il gruppo di ricerca di Catalisi che mi ha dato la possibilità di trasformare questa fine in un nuovo inizio.