Scuola di Scienze Corso di Laurea Magistrale in Fisica

Strategie di osservazione, metodo di analisi e qualità dei prodotti per un esperimento MIPAS di seconda generazione.

Relatore:

Prof. Massimo Carlotti

Presentata da: Marco Rizzato

Correlatore: Dott. Enzo Papandrea

> Sessione III Anno Accademico 2012/2013

Sommario

In questo elaborato verrà presentato un nuovo strumento satellitare chiamato MIPAS2k: uno spettrometro a trasformata di Fourier, in grado di misurare gli spettri di emissione dei gas atmosferici attraverso la tecnica di misure al lembo. Lo scopo di MIPAS2k è quello di determinare la distribuzione spaziale di quantità atmosferiche tra cui il VMR delle specie chimiche: O_3 , H_2O , HNO_3 e N_2O . La necessità di idearne un successore è nata dopo la perdita di contatto con lo strumento MIPAS da cui MIPAS2k, pur preservandone alcune caratteristiche, presenta differenze fondamentali quali: i parametri osservazionali, il tipo di detector utilizzato per eseguire le scansioni al lembo e la logica attraverso cui vengono ricavate le distribuzioni dei parametri atmosferici.

L'algoritmo attraverso cui viene effettuata l'inversione dei dati di MIPAS2k, chiamato FULL2D, usa la stessa logica di base di quello utilizzato per MIPAS chiamato Geo-Fit. La differenza fondamentale tra i due metodi risiede nel modo in cui i parametri sono rappresentati. Il Geo-Fit ricostruisce il campo atmosferico delle quantità da determinare tramite profili verticali mentre il FULL2D, grazie alle caratteristiche strumentali di MIPAS2k, rappresenta i valori del campo atmosferico all'interno degli elementi della discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera.

Il primo passo dello studio del nuovo strumento è stato quello della scelta degli intervalli spettrali da utilizzare nel modello FULL2D per ricavare i target atmosferici. Questa scelta è stata effettuata utilizzando una quantità scalare detta Information Load, che descrive l'informazione portata da ogni elemento della discretizzazione bidimensionale sulla quantità da determinare. Non avendo a disposizione misure del nuovo strumento si è dovuto valutarne le performance attraverso l'analisi su osservati simulati creati ricorrendo al modello diretto del trasferimento radiativo e utilizzando un'atmosfera di riferimento ad alta risoluzione. Le distribuzioni bidimensionali delle quantità atmosferiche di interesse sono state quindi ricavate usando il modello di inversione dei dati FULL2D applicato agli osservati simulati di MIPAS2k. I valori dei parametri ricavati sono stati confrontati con i valori dell'atmosfera di riferimento e analizzati attraverso l'utilizzo di mappe e quantificatori. In questo modo è stato possibile determinare la precisione dei prodotti di MIPAS2k rispetto al suo predecessore è stato confrontato il modo in cui i due strumenti modellano una particolare struttura atmosferica presente nell'atmosfera di riferimento.

I risultati mostrano che MIPAS2k riesce a ricavare la distribuzione spaziale dei parametri con un errore inferiore al 10% nelle regioni atmosferiche in cui il target considerato è presente in modo significativo, inoltre sotto l'ipotesi di ugual numero di punti spettrali per sequenza la qualità dei prodotti è leggermente migliore quando lo strumento opera utilizzando la risoluzione spettrale più bassa. Per entrambe le risoluzioni spettrali, la risoluzione spaziale orizzontale ha dimensione confrontabile con quella dello spicchio (circa 111 Km), mentre quella verticale è confrontabile al FOV dello strumento (2.2 Km). Infine il confronto tra i due strumenti ha mostrato che MIPAS2k è in grado di modellare con una precisione nettamente migliore la struttura atmosferica considerata rispetto al suo predecessore grazie alla sua miglior risoluzione spaziale.

Indice

1	Intr	oduzione	7		
2	2 Strumenti				
	2.1	MIPAS	3		
		2.1.1 Scopi climatologici di MIPAS	1		
		2.1.2 Caratteristiche MIPAS	5		
	2.2	IRLS)		
	2.3	MIPAS2k)		
		2.3.1 Strategia di osservazione di MIPAS2k)		
3	3 Strumenti matematici				
	3.1	Modello diretto	3		
3.2 Problema inverso		Problema inverso	5		
		3.2.1 Metodo di Gauss-Newton	3		
		3.2.2 Metodo di Levenberg-Marquardt	3		
		3.2.3 Errore sui parametri	3		
4	FUI	L2D 31	L		
	4.1	Introduzione	L		
	4.2	Geo-Fit	l		
		4.2.1 Microwindows	2		
		4.2.2 Look-Up Tables	3		
		4.2.3 Aspetti geometrici del Modello diretto	3		
	4.3	FULL2D razionale	1		
		4.3.1 Scelta della dimensione degli spicchi	5		
	4.4	Scelta delle Microwindows	3		

		4.4.1	Information Load	38				
		4.4.2	Selezione delle MWs per MIPAS2k	40				
5	Razionale per i retrieval su osservati simulati 4							
	5.1	Model	li atmosferici	46				
		5.1.1	IG2	46				
		5.1.2	Atmosfere di riferimento ECMWF e EMAC	47				
6	Risultati dei retrievals e discussione							
	6.1	Mappe	e	50				
		6.1.1	O_3	51				
		6.1.2	H_2O	53				
		6.1.3	HNO_3	55				
		6.1.4	N_2O	57				
	6.2	Quant	ificatori	59				
		6.2.1	Discussione	61				
	6.3	Risolu	zione spaziale	62				
7	Cor	nfronto	tra MIPAS e MIPAS2k	69				
8	Conclusioni 73							
Elenco delle figure 7'								
El	Elenco delle tabelle 7							
Bi	Bibliografia 80							

Capitolo 1

Introduzione

MIPAS (Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding) era uno spettrometro a trasformata di Fourier sviluppato dall'ESA (European Space Agency), operante a bordo del satellite ENVISAT (ENVIronamental SATellite) da marzo 2002 ad aprile 2012.

Il satellite ENVISAT percorreva un'orbita polare ad un'altezza di circa 800 Km compiendo una mappatura completa del pianeta ogni 33 giorni circa ed era costituito da un totale di 10 strumenti, tra cui lo stesso MIPAS.

Nel 2012, dopo alcuni mesi dalla perdita di contatto con ENVISAT, la missione è stata dichiarata conclusa e con esso si è concluso anche il lavoro effettuato di MIPAS.

Lo strumento MIPAS è stato costruito allo scopo di determinare i profili verticali di temperatura, pressione e Volume Mixing Ratio (VMR) di numerose specie chimiche coinvolte nella chimica dell'atmosfera. A tal scopo misurava gli spettri di emissione dell'atmosfera attraverso la tecnica di misure al lembo nell'intervallo spettrale compreso tra $680 - 2410 \ cm^{-1}$; in tale intervallo spettrale molte delle molecole importanti dal punto di vista climatico presentano bande vibro-rotazionali con linee di emissione ben definite.

La tecnica di misure al lembo consiste nell'effettuare una serie consecutiva di misure, con diverse geometrie di osservazione, la cui linea di vista non interseca mai la superficie terrestre. In questo modo misurando l'emissione dell'atmosfera è possibile ottenere misure di giorno e di notte con copertura globale.

Una caratteristica fondamentale di MIPAS era quella di poter effettuare misure

utilizzando diversi modi di osservazione. Le caratteristiche che contraddistinguono ogni modo d'osservazione sono: la risoluzione spettrale, l'intervallo di quote coperto dalle misure, il passo verticale della sequenza di limb scanning e la direzione delle linee di vista rispetto alla direzione del moto di ENVISAT lungo l'orbita.

Da gennaio 2005 a causa del deterioramento meccanico della guida di uno specchio dell'interferometro è stato necessario riconfigurare tutti i modi d'osservazione in modo tale da lavorare al 41% della risoluzione spaziale usata nella configurazione precedente. Le caratteristiche strumentali con cui MIPAS ha lavorato prima del deterioramento vengono indicate con la sigla FR (Full Resolution) mentre quelle successive con RR (Reduced Resolution).

Prima del gennaio 2005 MIPAS ha operato prevalentemente nel modo "nominale" (Cap. 2.3.1), caratterizzato da una risoluzione spettrale di 0.035 cm^{-1} con cui effettuava scansioni al lembo guardando all'indietro rispetto alla direzione di EN-VISAT lungo l'orbita. Ogni sequenza di scansioni al lembo era caratterizzata da 17 geometrie di osservazione con quote di tangenza che variavano da 6 a 68 Km con passo di 3 o 5 Km. ENVISAT aveva un periodo orbitale di 101 minuti in cui MIPAS compiva circa 72 sequenze scansioni al lembo con separazione di circa 510 Km tra due scansioni consecutive.

Oltre al modo nominale MIPAS poteva operare utilizzando altri modi d'osservazione detti "speciali". Di particolare interesse per il lavoro di questa tesi è il modo speciale "S6", ideato per lo studio della regione atmosferica compresa tra 6 e 35 Km di quota detta "Upper Troposphere/Lower Stratosphere" (UTLS), in cui la risoluzione spettrale era ridotta a $0.1 \ cm^{-1}$. Con questo modo speciale, data la diversa risoluzione spettrale rispetto al modo "nominale", lo strumento effettuava circa 255 scansioni al lembo per orbita con un campionamento orizzontale dell'atmosfera di circa 155 Km tra una scansione e la successiva.

Dopo l'aprile del 2012 con la fine di MIPAS non esistono più strumenti orbitanti che operano utilizzando la tecnica di misure di emissione al lembo con caratteristiche e obbiettivi simili a quelli di MIPAS. Per questo motivo si è sentita la necessità di creare un nuovo strumento in grado di continuare il lavoro da lui cominciato.

Come possibile successore di MIPAS è stato proposto un nuovo esperimento det-

to PREMIER [1] (PRocess Exploration through Measurements of Infrared and millimetre-wave Emitted Radiation) ideato per studiare in particolare la composizione della medio-alta troposfera e della bassa stratosfera, regione di fondamentale importanza dal punto di vista climatologico. Questo esperimento prevedeva inoltre l'utilizzo contemporaneo di due strumenti diversi, che sono: IRLS (InfraRed Limb Sounding) e MWLS (Millimetre-Wave Limb-Sounder). La caratteristica principale di IRLS è quella di determinare la struttura dei parametri chimico-fisici atmosferici attraverso l'utilizzo di un'array detector bidimensionale (2D) formato da 100 x 100 pixels con cui sarebbe riuscito ad eseguire contemporaneamente ben 10000 misure al lembo.

La proposta di PREMIER non è stata selezionata dall'agenzia spaziale europea (ESA) perchè l'utilizzo dell'array detector 2D con cui era possibile eseguire contemporaneamente un numero elevatissimo di sequenze al lembo e l'utilizzo di due distinti strumenti è stato ritenuto troppo dispendioso sia dal punto di vista dell'analisi dei dati che dal punto di vista economico.

In questo studio consideriamo un successore di MIPAS con caratteristiche meno ambiziose di IRLS, che chiamiamo MIPAS2k. A differenza di IRLS questo strumento è stato ideato per utilizzare una tecnologia degli array detector 1D, formato da un vettore di pixel, con il quale sia possibile effettuare un'intera scansione al lembo per ogni corsa dello specchio mobile dell'interferogramma, riuscendo così a risparmiare tempo e ad effettuare un numero maggiore di scansioni al lembo per orbita rispetto a MIPAS.

Per definire le caratteristiche strumentali di MIPAS2k, quali la risoluzione spettrale ci siamo ispirati allo strumento IRLS di PREMIER. Nel modo "nominale" MIPAS2k utilizza la stessa risoluzione dello strumento IRLS nel modo detto "chemistry mode" di $0.2 \ cm^{-1}$. Oltre a tali caratteristiche per il nuovo strumento sono stati utilizzati gli stessi intervalli spettrali, detti microwindows (MWs), di IRLS per ricavare la distribuzione spaziale dell' O_3 nel modo "nominale" di MIPAS.

L'obbiettivo dello studio è stato quello di valutare le performance dello strumento MIPAS2k, determinandone alcune caratteristiche fondamentali quali: la precisione dei prodotti, la loro copertura spaziale e risoluzione spaziale.

Per studiare queste caratteristiche abbiamo analizzato la distribuzione spaziale del

VMR di alcune delle molecole target di MIPAS: O_3 , H_2O , HNO_3 e N_2O . La scelta di utilizzare queste molecole non è casuale, infatti presentano tutte una distribuzione spaziale caratteristica. L' O_3 ha una distribuzione atmosferica che presenta gradienti nel VMR sia in verticale che in orizzontale; caratteristica utile per studiare in maniera adeguata la risoluzione spaziale dello strumento. Molecole come H_2O e N_2O presentano un forte gradiente verticale, mentre l' HNO_3 non presenta una distribuzione spaziale particolare, ma è caratterizzato da valori bassi di VMR.

Come detto in precedenza per MIPAS2k si possono utilizzare le MWs dell' O_3 create per IRLS. Per le altre molecole da analizzare le MWs di IRLS non esistevano, per questo motivo dovevano essere create utilizzando lo stesso algoritmo con cui sono state create le MWs dell'Ozono di IRLS. Fra quelle così generate la scelta delle MWs da utilizzare per ogni specie chimica è stata effettuata utilizzando una quantità scalare detta Information Load (Cap. 4.4.1), che descrive l'informazione portata all'interno di una singola porzione di atmosfera della quantità da determinare. In questo modo si potranno scegliere le MWs che portano la maggior quantità di informazione, coprendo al meglio l'intervallo di quote di interesse.

Uno dei problemi principali per lo studio dello strumento MIPAS2k è quello di determinare le sue caratteristiche senza avere a disposizione misure con cui poter trarre delle conclusioni. Per questo motivo le misure dello strumento MIPAS2k dovevano essere simulate ricorrendo al modello diretto del trasferimento radiativo e utilizzando un'atmosfera di riferimento con una adeguata risoluzione spaziale.

Uno spettrometro non misura direttamente le quantità da determinare, ma gli spettri di emissione dei gas atmosferici. Il problema di determinare una quantità a partire dalle misure indirette della quantità stessa è detto "problema inverso" ed il metodo attraverso cui tali quantità vengono determinate è detto "metodo di inversione dei dati". Per quanto riguarda il modello di inversione dei dati di MIPAS2k, detto FULL2D e scritto in FORTRAN, si è deciso di utilizzare come base di partenza quello utilizzato da MIPAS, detto Geo-Fit, con cui vengono determinati i valori delle quantità atmosferiche di interesse. Nella strategia del Geo-Fit vengono utilizzate contemporaneamente tutte le osservazioni sull'intera orbita tramite una discretizzazione 2D dell'atmosfera per poter studiare la variabilità atmosferica orizzontale. In

CAPITOLO 1

questo modo ogni osservazione contribuisce a determinare la quantità incognita in più punti tra tutti quelli spazzati dalle linee di vista, riuscendo così ad utilizzare nel miglior modo possibile tutta l'informazione a disposizione. L'utilizzo del modello Geo-Fit per invertire i dati dello strumento MIPAS2k risulta inadeguato a causa delle sue caratteristiche come ad esempio il numero molto maggiore di misure per orbita rispetto a MIPAS. Il modello FULL2D per sfruttare al meglio le caratteristiche del nuovo strumento quindi, pur utilizzando come strategia di base quella adottata dal Geo-Fit, si distingue da questo per il modo in cui vengono ricavati i valori dei parametri finali e come questi vengono descritti (Cap. 4).

Come detto in precedenza, lo strumento MIPAS poteva lavorare nel modo speciale "S6" con risoluzione $0.1 \ cm^{-1}$, di cui sono disponibili le MWs create appositamente. Questa disponibilità è stata sfruttata per creare un nuovo modo d'osservazione di MIPAS2k, oltre a quello "nominale", detto modo d'osservazione "S6", con risoluzione di $0.1 \ cm^{-1}$.

In questo particolare modo d'osservazione MIPAS2k effettua un campionamento orizzontale dell'atmosfera con frequenza inferiore rispetto al modo "nominale" eseguendo la metà delle scansioni al lembo per orbita in quanto il tempo per effettuare una misura raddoppia poichè raddoppia il cammino ottico nell'interferogramma. Per scegliere quali delle MWs utilizzare con risoluzione $0.1 \ cm^{-1}$ per ogni molecola viene utilizzato l'Information Load come nel caso precedente. In questo confronto per rendere paragonabili i risultati ottenuti utilizzando le due risoluzioni dello strumento si è scelto di utilizzare per ogni molecola un numero di punti spettrali per sequenza analogo a quelli utilizzati con la risoluzione $0.2 \ cm^{-1}$.

Un ultimo obbiettivo dello studio, una volta selezionate le MWs ed aver ottenuto i risultati per entrambe le risoluzioni spettrali considerate per MIPAS2k, è quello di confrontare le performance dei due modi d'osservazione. Per fare questo i dati dovranno essere analizzati attraverso l'utilizzo di appositi quantificatori, creati per lo scopo, che permetteranno inoltre di definire le caratteristiche del nuovo strumento per le due risoluzioni spettrali.

Capitolo 2

Strumenti

In questo capitolo vengono descritti brevemente gli strumenti MIPAS [2, 3, 4], IRLS [1] e MIPAS2k che è lo strumento il cui studio è presentato in questo elaborato. I tre strumenti sono spettrometri a trasformata di Fourier in grado di misurare gli spettri di emissione dei gas atmosferici attraverso la tecnica di misure al lembo. MIPAS ha operato a bordo del satellite ENVISAT [5] da marzo 2002 all'aprile 2012, mentre IRLS è uno esperimento proposto nel 2008 come possibile successore di MIPAS, ma la sua proposta non è stata selezionata dall'ESA. La sua descrizione è stata riportata poichè molte delle caratteristiche di MIPAS2k sono state prese da IRLS stesso. Infine MIPAS2k è lo strumento il cui studio verrà presentato dettagliatamente in questo elaborato.

Per ogni strumento viene di seguito presentata una breve introduzione, gli scopi e le caratteristiche tecniche.

2.1 MIPAS

MIPAS (Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding) è uno spettrometro a Trasformata di Fourier sviluppato dall'ESA situato a bordo del satellite ENVISAT il quale ha operato in orbita polare dal 1 marzo 2002 fino al 8 aprile 2012 data in cui è avvenuta la perdita di contatto con il satellite. MIPAS misurava gli spettri di emissione dei gas atmosferici ad alta risoluzione attraverso la tecnica delle misure al lembo nella medio atmosfera operando nel medio infrarosso (680 – 2410) cm^{-1} , intervallo spettrale in cui la maggior parte dei gas rilevanti dal punto di vista atmosferico hanno spettri di emissione. La tecnica di misura al lembo, grazie alla particolare geometria di osservazione, permette di ricavare la concentrazione di gas ottenendo una risoluzione verticale nettamente migliore rispetto a quella che si può ottenere con uno strumento che utilizza tecnica di osservazione al nadir.

2.1.1 Scopi climatologici di MIPAS

All'interno del sistema terra l'atmosfera gioca un ruolo di primaria importanza, infatti è un efficiente mezzo di trasporto di calore, acqua ed altre sostanze.

Lo scopo di MIPAS era quello di studiare i processi chimici e dinamici dell'atmosfera terrestre. La comprensione di questi fenomeni è di fondamentale importanza in molte discipline scientifiche che hanno avuto una notevole crescita negli ultimi decenni. Questa crescita è dovuta in gran parte all'aumento dell'interesse pubblico verso le discipline che studiano gli effetti delle attività umane sull'atmosfera come il lento calo dell'ozono stratosferico a partire dagli anni '80, il riscaldamento globale e l'aumento dell'inquinamento atmosferico specialmente nelle zone industrializzate.

Le aree di interesse di MIPAS possono essere elencate nel seguente modo (vedi Rif. [2]):

- <u>Chimica della stratosfera</u>, lo studio dell'andamento dell'Ozono stratosferico dopo il protocollo di Montreal, trattato con il quale è stata ridotta la produzione delle sostanze (CFC) principale causa della riduzione dell'ozono stratosferico in particolare nelle zone polari.
- Chimica e fisica dell'alta troposfera, lo studio del vapore acqueo in troposfera è molto importante, infatti l'acqua è la molecola che contribuisce maggiormente all'effetto serra. E' stato rilevante inoltre lo studio del trasporto verticale di certe molecole dalla bassa all'altra troposfera.
- Interazione tra stratosfera e troposfera, la composizione chimica della stratosfera è determinata in gran parte dal passaggio dell'aria troposferica attraverso la tropopausa nella zona tropicale. Si è anche scoperto che la rottura del vortice polare è guidata dai disturbi d'onda causati dai sistemi meteorologici tropicali.
- <u>Chimica e fisica dell'alta atmosfera</u>, in particolare lo studio della temperatura e la concentrazione di diverse specie chimiche nella mesosfera e bassa ter-

mosfera (MLT). Le osservazioni hanno contribuito a comprendere il bilancio energetico, la chimica, la dinamica e le interazioni nella medio-alta atmosfera.

2.1.2 Caratteristiche MIPAS

Lo strumento MIPAS misurava gli spettri a diverse quote di tangenza attraverso la tecnica di misure al lembo (vedi Fig. 2.1). Il campo di vista di MIPAS (FOV) è 3 Km in altezza e circa 30 km in larghezza alla quota di tangenza in modo tale da raccogliere una radianza sufficiente per un buon rapporto segnale/rumore. L'intervallo spettrale coperto si estende tra $680 - 2410 \ cm^{-1}$, diviso in 5 bande riportate in tabella 2.1. Durante la maggior parte della missione MIPAS ha operato nel modo definito "nominale" in cui le misure consistevano in scansioni al lembo consecutive eseguite in direzione opposta rispetto alla direzione del moto lungo l'orbita di EN-VISAT.

MIPAS ruotava intorno alla terra con orbita polare eseguendo circa 72 sequenze al lembo per orbita ed era in grado di compiere 14 orbite polari in un giorno, come mostrato in Fig. 2.2. Ogni sequenza al lembo era costituita da 17 geometrie di osservazione in cui le rispettive quote di tangenza variavano da 6 a 68 km con passo irregolare di 3-5 Km. La risoluzione spettrale dello strumento era pari al valore massimo, definita dalla massima differenza di cammino ottico (OPD), di $0.025 \ cm^{-1}$ che corrisponde alla larghezza a metà altezza (FWHM) dello spettro non apodizzato di $0.035 \ cm^{-1}$.



Figura 2.1: Geometrie di osservazione di MIPAS, lo strumento è in grado di effettuare misure utilizzando due direzioni di puntamento azimutale.

Oltre al modo "nominale" sono stati creati altri modi di osservazione definiti "speciali" che potevano essere utilizzati in base ai diversi obbiettivi scientifici da raggiungere; i modi "speciali" differiscono da quello "nominale" dalla risoluzione spettrale adottata, dall'intervallo verticale coperto, dal passo verticale e dalla direzione delle linee di vista.

Il modo speciale "S6" [6] è stato ideato per misurare la regione dell'alta troposfera/bassa stratosfera. Ogni scansione al lembo era costituita da 12 geometrie di osservazione, in cui le quote di tangenza variavano tra i 6 e 35 Km con passo irregolare. La risoluzione spettrale del modo "S6" è di $0.1 \ cm^{-1}$, con cui MIPAS effettuava una scansione ogni 155 Km per un totale di circa 255 scansioni per orbita, molte di più rispetto a quelle ottenute nel modo d'osservazione "nominale".

Le caratteristiche del modo "nominale" e dei modi speciali "speciali" sono riportate in Tabella 2.2.



Figura 2.2: Esempio della copertura geografica giornaliera di MIPAS (14 orbite con circa 72 scansioni al lembo per orbita).

Una caratteristica fondamentale dello strumento è il NESR (Noise Equivalent Spectral Radiance) che descrive il rumore strumentale associato alle misure in termini della radiazione incidente. Essa varia al variare della frequenza e per gli scopi dello strumento il NESR deve essere sempre inferiore a 50 $nW \cdot cm^{-2} \cdot sr^{-1}$. Nella tabella 2.1 sono riportati i valori della NESR per ogni banda spettrale e l'intervallo spettrale di ogni banda.

Banda spettrale	$\operatorname{Intervallo} (cm^{-1})$	$\boxed{\begin{array}{c} \text{NESR} \\ (nWcm^{-2}sr^{-1}) \end{array}}$	
а	685.0 - 970.0	50	
ab	1020.0 - 1170.0	40	
b	1215.0 - 1500.0	20	
С	1570.0 - 1750.0	6	
d	1820.0 - 2410.0	4.2	

Tabella 2.1: Bande spettrali e valori del NESR.

Dal gennaio 2005, a causa del deterioramento meccanico della guida di uno specchio dell'interferometro, tutti i modi di osservazione sono stati riconfigurati in modo tale da adattarsi a una riduzione del 41% della risoluzione spettrale rispetto a quella usata nella configurazione precedente, che risulta essere 0.0625 cm^{-1} . A causa di ciò il modo di osservazione "nominale" e quelli "speciali" sono stati modificati; per quanto riguarda il modo nominale l'intervallo di altezze in cui agisce va da 6 a 70 Km con passo irregolare da 1.5 Km a 3 Km con cui MIPAS effettuava circa 96 sequenze al lembo per orbita, ognuna delle quali era costituita da 27 geometrie di osservazione.

Observation mode	Objectives	Pointing direction	Coverage	Altitude range (Km)	Verical spacing (Km)	Horizontal spacing (Km)
Nominal	Stratospheric chemistry	rear	Global	6-68	3-8	530
S1	Polar chemistry	rear	Global	7-55	2-10	420
S2	Exchange between Stratosphere and Troposphere	rear	Global	5-40	1.5-10	420
S3	Study of major air traffic corridor	side	Primarily North of 25 lat.	6-40	1.5-10	330
S4	Small scale structures in the middle Atmosphere	rear	Global	8-53	3	390
S5	Diurnal changes near the terminator	rear	Near the termina- tor	15-60	3	480
S6	Upper Tropo- sphere/Lower Stratosphere	rear	Global	6-35	2-7	120
S7	Upper atmosphere	rear	Global	20-160	3-8	800

Tabella 2.2: Caratteristiche dei modi d'osservazione di MIPAS prima del gennaio 2005.

2.2 IRLS

Come possibile successore di MIPAS, data l'importanza dei dati raccolti e dei i risultati ottenuti fino ad allora, è sorta la necessità di progettare un nuovo strumento in grado di ottenere misure in modo da poter continuare lo studio di MIPAS. A tale scopo è stato proposto un nuovo esperimento, con caratteristiche diverse dal precedente, detto PREMIER [1] (PRocess Exploration through Measurements of Infrared and millimetre-wave Emitted Radiation); questo strumento è stato ideato per analizzare in particolare i processi che controllano la composizione della medioalta troposfera e della bassa stratosfera, regione di primaria importanza dal punto di vista climatologico.

La caratteristica principale di PREMIER è quella di ricostruire la distribuzione dei costituenti atmosferici attraverso una descrizione 3D. Questo richiedeva l'utilizzo di una matrice di rivelatori formata da 100 x 100 pixels con cui sarebbe riuscito ad eseguire contemporaneamente 10000 misure al lembo. Tali caratteristiche necessitavano l'utilizzo combinato di misure al lembo da due strumenti diversi, che sono:

- InfraRed Limb Sounder (IRLS), uno spettrometro a trasformata di Fourier, ideato per ottenere misure dei componenti atmosferici ad alta risoluzione;
- Millimetre-Wave Limb-Sounder (MWLS), ottimizzato per la misura di aerosol e nubi nell'alta troposfera.

Lo strumento IRLS era stato ideato per lavorare con due modi d'osservazione distinti: "chemistry mode" e "dynamics mode". Il primo modo d'osservazione utilizza una risoluzione spettrale di $0.2 \ cm^{-1}$ per risolvere i costituenti atmosferici con valori di VMR basso, mentre il secondo modo utilizza una risoluzione spettrale di $1.25 \ cm^{-1}$

La proposta di PREMIER come successore di MIPAS non è stata selezionata dall'E-SA; il motivo di tale decisione risiede nella complessità del sistema di elaborazione dei dati 3D che utilizza matrici di pixels i quali effettuano contemporaneamente un numero elevato di sequenze al lembo e l'utilizzo di due distinti strumenti. Queste caratteristiche sono state ritenute troppo dispendiose sia dal punto di vista economico che dal punto di vista dell'analisi dei dati.

2.3 MIPAS2k

MIPAS2k è lo strumento presentato in questo elaborato, ideato per essere meno dispendioso rispetto a IRLS sia dal punto di vista dell'analisi dei dati che dal punto di vista economico. Come si puó intuire dal nome stesso, è stato ideato incorporando alcune caratteristiche prese da IRLS (come le caratteristiche strumentali) e altre da MIPAS come la logica dell'elaborazione dei dati.

La caratteristica fondamentale di MIPAS2k, che lo distingue sia da MIPAS che da IRLS, è la scelta di non utilizzare il singolo pixel detector o una matrice di pixels, ma di utilizzare un array detector 1D verticale formato da un vettore di pixel con il quale si effettua una scansione al lembo per ogni corsa dello specchio mobile.

Come vedremo in seguito, la ricostruzione finale dei parametri da determinare non avviene tramite profili verticali come nel caso di MIPAS, ma attraverso una descrizione 2D dell'atmosfera la quale viene suddivisa in spicchi in ognuno dei quali è riportato il valore medio del parametro atmosferico al suo interno. La logica attraverso cui viene raggiunta tale descrizione verrà presentata in dettaglio nel capitolo 4.

2.3.1 Strategia di osservazione di MIPAS2k

Durante lo studio di MIPAS2k sono state analizzate 2 strategie d'osservazione, in entrambi i casi l'intervallo spettrale coperto è lo stesso utilizzato dallo strumento IRLS di PREMIER, cioè diviso in due bande spettrali: banda A tra $770-980 \ cm^{-1}$ e banda B tra $1070-1650 \ cm^{-1}$

Il primo modo detto "nominale", in analogia con il "chemistry mode" di IRLS, ha risoluzione spettrale di $0.2 \ cm^{-1}$. Ogni orbita è costituita da 401 sequenze di scansioni al lembo, effettuate contemporaneamente utilizzando l'array detector 1D, ognuna della quali è costituita da 25 geometri di osservazione.

Nel secondo modo d'osservazione detto "S6" la risoluzione spettrale è di $0.1 \ cm^{-1}$, ogni orbita è costituita da 201 sequenze, la metà rispetto al modo "nominale". Infatti, dimezzando la risoluzione spettrale il tempo impiegato per effettuare una misura raddoppia in quanto raddoppia il cammino ottico nell'interferogramma.

Ogni sequenza è costituita da 25 geometrie di osservazione come per il modo "nominale", mentre la distanza orizzontale tra due sequenze al lembo è di circa 220 Km.

	MIPAS	MIPAS2k (nominale)	MIPAS2k (S6)
Risoluzione spettrale	$0.035 \ cm^{-1}$	$0.2 \ cm^{-1}$	$0.1 \ cm^{-1}$
Intervallo spettrale	$680 - 2410 \ cm^{-1}$	$770 - 1650 \ cm^{-1}$	$770 - 1650 \ cm^{-1}$
Intervallo di quote	$6-68 \ Km$	$6-54 \ Km$	$6-54 \ Km$
Numero di scansioni per orbita	72	401	201
$\frac{NESR}{(nWcm^{-2}sr^{-1})}$	da 2 a 50	1	$\sqrt{2}$
FOV verticale	$3 \ Km$	$2.2 \ Km$	$2.2 \ Km$

Tabella 2.3: Confronto tra le caratteristiche di MIPAS("nominale") e MIPAS2k.

Per entrambi i modi d'osservazione l'intervallo di altezze coperto dalle misure si estende da 6 Km a 54 Km di quota e la FOV è di 2.2 Km in altezza e circa 30 km in larghezza.

Il NESR dello strumento MIPAS2k nel modo d'osservazione "nominale" è sempre inferiore a 1 $nW \cdot cm^{-2} \cdot sr^{-1}$ per gli obbiettivi che lo strumento deve raggiungere, mentre per il modo "speciale" S6 è stato moltiplicando per un fattore $\sqrt{2}$ per considerare la diversa risoluzione spettrale [7].

Nella tabella 2.3 vengono confrontate le caratteristiche di MIPAS nel modo d'osservazione "nominale" con quelle di MIPAS2k nei suoi due modi d'osservazione: "nominale" e "S6".

Capitolo 3

Strumenti matematici

In questo capitolo vengono descritti i principali strumenti matematici utilizzati dal modello di inversione dei dati, che sono: il modello diretto e la soluzione del problema inverso [8].

Con il termine modello diretto viene indicato il procedimento attraverso cui, a partire dalle caratteristiche chimico-fisiche dell'atmosfera descritte nei profili di distribuzione verticale, vengono simulati gli spettri osservati dallo strumento, mentre il problema di ottenere i valori delle quantità atmosferiche da determinare a partire dagli spettri osservati dallo strumento è detto problema inverso.

3.1 Modello diretto

Il segnale misurato dallo strumento è determinato dalla radianza che raggiunge lo spettrometro modificata dagli effetti strumentali che sono dovuti alla risoluzione spettrale finita e al campo di vista finito dello strumento (Field Of View, FOV). La radianza atmosferica che raggiunge lo strumento per un dato angolo di puntamento, definito dalla quota di tangenza z_t , e per una data frequenza spettrale $\tilde{\nu}$ può

essere ricavata dall'equazione del trasferimento radiativo:

$$L(\tilde{\nu}, z_t) = \int_{x_i}^{x_0} \left[B(\tilde{\nu}, x) c(\tilde{\nu}, x) \eta(x) \right] exp\left[-\int_x^{x_0} c(\tilde{\nu}, x') \eta(x') dx' \right] dx$$
(3.1)

dove x indica la posizione lungo la linea di vista compresa tra l'osservatore x_0 ed il punto più distante x_i (vedi Fig. 4.2 discussa nel capitolo 4). $B(\tilde{\nu}, x)$ è la funzione sorgente che nel caso di equilibrio termodinamico locale è uguale alla funzione di

Planck. $c(\tilde{\nu}, x)$ è la sezione d'urto per assorbimento ed $\eta(x)$ è la "number density" delle molecole che contribuiscono a determinare il valore della sezione d'urto. L'esponente presente nell'Eq. 3.1 rappresenta la trasmittanza atmosferica tra $x \in x_0$. La sezione d'urto di assorbimento $c(\tilde{\nu}, x)$ è data dalla media pesata delle sezioni d'urto delle singole molecole che assorbono nell'intervallo spettrale considerato pesate per il rispettivo VMR ed è definita come:

$$c(\tilde{\nu}, x) = \sum_{m=1}^{molecole} c_m(\tilde{\nu}, x) X_m(x)$$
(3.2)

dove l'indice m indica la molecola che si sta considerando, $c_m(\tilde{\nu}, x)$ è la sezione d'urto della molecola m e X_m è il volume mixing ratio della molecola m nella posizione x lungo la linea di vista. Nelle nostre applicazioni i valori delle sezioni d'urto delle singole molecole $c_m(\tilde{\nu}, x)$ non vengono calcolate direttamente dal programma, ma vengono utilizzati i valori precalcolati conservati in appositi files detti Look-Up Tables (LUTs), permettendo così di risparmiare un notevole tempo di calcolo (vedi Cap. 4.2.2).

Nel caso pratico il calcolo del segnale L che arriva allo strumento è effettuato tramite l'utilizzo della versione discreta dell'equazione del trasferimento radiativo 3.1. L'integrale viene calcolato attraverso una sommatoria sugli N cammini ottici in cui è suddivisa la linea di vista:

$$S = \sum_{p=1}^{N} B_p [1 - exp(\tau_p)] \left(\prod_{k=p+1}^{N} exp(-\tau_{k,p}) \right)$$
(3.3)

dove B_p è la funzione di Planck calcolata per la temperatura nel cammino ottico p e τ_p è la trasmittanza della linea di vista espressa come:

$$\tau_p = \sum_{g=1}^{N_{gas}} c_{g,p} col_{g,p} + c_{cont_p} col_{air_p}$$
(3.4)

dove c_{cont_p} rappresenta il contributo della profondità ottica derivante dal continuo atmosferico [9], mentre col_{air_p} è la colonna d'aria per il percorso p del cammino ottico.

Una volta ricavata la radianza che arriva allo strumento, per determinare il segnale

misurato dallo spettrometro bisogna considerare gli effetti dovuti alla risoluzione finita dello strumento e il suo FOV finito. Per fare questo si effettua la convoluzione della radianza atmosferica $L(\tilde{\nu}, z_t)$ con la funzione strumentale apodizzata dello strumento (AILS) e con la funzione che descrive il FOV:

$$S(\tilde{\nu}, z_t) = \int \int L(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}', z_t - z_{t'}) \times AILS(\tilde{\nu}') d\tilde{\nu}' \ FOV(z_{t'}) dz_{t'}$$
(3.5)

La funzione strumentale apodizzata (AILS) è ottenuta attraverso la convoluzione della funzione strumentale (ILS) con la funzione apodizzante utilizzata per misurare gli spettri.

La funzione strumentale (ILS) è definita come la risposta dello spettrometro ad un impulso di radiazione monocromatica e nel caso di un perfetto spettrometro a trasformata di Fourier è data della funzione *sinc*, associata alla risoluzione spettrale finita dello strumento.

Gli spettri misurati sono apodizzati con le funzioni di Norton-Beer forti [10], in modo da ridurre l'interferenza delle linee distanti all'interno della singola MW.

La FOV descrive gli effetti dovuti alla dimensione finita del campo di vista dello strumento in funzione della quota di tangenza z_t ; per simulare questo effetto si effettua la convoluzione tra la funzione FOV e la radianza atmosferica misurata. Questa convoluzione richiede il calcolo del modello diretto per un numero di linee di vista che coprono l'intervallo verticale del FOV.

3.2 Problema inverso

Lo scopo di uno spettrometro satellitare è quello di ricavare la distribuzione 2D delle quantità di interesse a partire della radianza emessa dall'atmosfera e che arriva allo spettrometro (per diversi valori della frequenza spettrale e per un dato angolo di puntamento).

La descrizione fatta di seguito del problema inverso è valida indipendentemente dal metodo con cui vengono descritte le distribuzioni spaziali dei parametri finali.

Lo spettrometro osserva la radianza spettrale $L(\overline{\nu}, \theta)$ emessa dall'atmosfera al variare della frequenza $\overline{\nu}$ e della geometria di osservazione θ . Il modello diretto, indicato con $\mathbf{F}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, simula gli osservati a partire da un set di parametri $\mathbf{p} \in \mathbf{q}$: \mathbf{p} rappresenta la quantità che è direttamente legata alla radianza spettrale ma non è ricavata, mentre \mathbf{q} rappresenta la quantità da ricavare ossia la distribuzione del parametro atmosferico da analizzare. Il problema inverso consiste nel cercare un set di valori di \mathbf{q} che producano la miglior simulazione degli osservati.

Lo spettrometro effettua un numero discreto di misure (n). I valori finali della quantità da ricavare, contenuti nel vettore \mathbf{x} di dimensione m, risultano anch'essi discreti. Se assumiamo una distribuzione normale degli errori delle misure, il metodo generalmente usato per ricavare i parametri che riproducono la miglior simulazione degli osservati è quello dei minimi quadrati non lineari (non linear least-squares fit). Tale procedura basata sul metodo della massima verosimiglianza [11] si basa sulla ricerca dei valori di \mathbf{x} per cui la funzione χ^2 sia minimizzata. La funzione χ^2 è definita come la somma quadratica delle differenze tra gli osservati e i simulati, pesata per il rumore delle misure. Date n misure della radianza spettrale S_i e i relativi osservati simulati dati dal problema diretto $\mathbf{F}(\mathbf{p}, \mathbf{\tilde{x}})$, dove \tilde{x} indica i valori del parametro assunto, se indico con \mathbf{n} il vettore delle differenze tra gli osservati e i simulati e con \mathbf{V}_n la matrice di varianza-covarianza associata al vettore \mathbf{n} , la quantità da minimizzare è:

$$\chi^2 = \mathbf{n}^T \mathbf{V}_n^{-1} \mathbf{n} \tag{3.6}$$

Gli osservati non dipendono linearmente dai parametri da ricavare \mathbf{x} e l'Eq. 3.6. non è una funzione quadratica in \mathbf{x} , per questo motivo i valori di \mathbf{x} che minimizzano l'Eq. 3.6 non possono essere determinati.

3.2.1 Metodo di Gauss-Newton

E' possibile ottenere una espressione approssimata di χ^2 , sotto l'assunzione che i valori dei parametri assunti non si discostino troppo da quelli reali, effettuando un'espansione in serie di Taylor attorno del vettore assunto \tilde{x} :

$$\chi^{2}(\mathbf{x}) = \chi^{2}(\tilde{\mathbf{x}}) + \nabla \chi^{2} \mathbf{y} + \frac{1}{2} \mathbf{y}^{T} \nabla^{2} \chi^{2} \mathbf{y}$$
(3.7)

dove $\nabla \in \nabla^2$ sono rispettivamente il gradiente e la matrice Hessiana della funzione $\chi^2 \in \mathbf{y} = \mathbf{x} - \mathbf{\tilde{x}}$ è il vettore di dimensione *m* che fornisce le correzioni da apportare ai parametri assunti in $\mathbf{\tilde{x}}$ per ottenere i valori corretti in \mathbf{x} .

La formula 3.7 può essere scritta nella forma 3.8 sviluppando il gradiente e la matrice Hessiana della funzione χ^2 , indicando con **K** la matrice Jacobiana, cioè la matrice con *n* righe ed *m* colonne. L'elemento K_{ij} è la derivata della i-esima osservazione rispetto al parametro j-esimo.

$$\chi^{2}(\mathbf{x}) = \chi^{2}(\tilde{\mathbf{x}}) - 2(\mathbf{K}^{T}\mathbf{V}_{n}^{-1}\mathbf{n})^{T}\mathbf{y} + 2\mathbf{y}^{T}\left(\mathbf{K}^{T}\mathbf{V}_{n}^{-1}\mathbf{K} - \frac{\partial\mathbf{K}}{\partial\mathbf{x}}\mathbf{V}_{n}^{-1}\mathbf{n}\right)\mathbf{y}$$
(3.8)

Se assumo il problema lineare (eliminando le derivate di ordine superiore al primo), il termine $\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \mathbf{x}}$ può essere trascurato e i valori di \mathbf{y} che minimizzano la funzione χ^2 sono dati da:

$$\mathbf{y} = (\mathbf{K}^T \mathbf{V}_n^{-1} \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{V}_n^{-1} \mathbf{n}$$
(3.9)

La matrice che moltiplicata per il vettore \mathbf{n} , da come risultato il vettore \mathbf{y} è:

$$\mathbf{D} = (\mathbf{K}^T \mathbf{V}_n^{-1} \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{V}_n^{-1}$$
(3.10)

Se l'ipotesi di linearità non è soddisfatta il minimo non viene raggiunto, ma viene fatto solo un passo verso di questo e il risultato è fornito dal vettore $\mathbf{x} = \mathbf{y} - \tilde{\mathbf{x}}$ (dove \mathbf{y} è il vettore in Eq. 3.9) che rappresenta una stima migliore del parametro rispetto a $\tilde{\mathbf{x}}$. In tal caso tutto il procedimento deve essere effettuato nuovamente partendo dalla nuova stima del parametro e l'Eq. 3.9 può essere riscritta come:

$$\mathbf{x}_{iter} - \mathbf{x}_{iter-1} = (\mathbf{K}_{iter-1}^T \mathbf{V}_n^{-1} \mathbf{K}_{iter-1})^{-1} \mathbf{K}_{iter-1}^T \mathbf{V}_n^{-1} \mathbf{n}_{iter-1}$$
(3.11)

dove \mathbf{x}_{iter-1} è il risultato dell'iterazione precedente, $\mathbf{K}_{iter-1}^T = \partial \mathbf{F}(\mathbf{p}, \mathbf{x}_{iter-1}) / \partial \mathbf{x}_{iter-1}$ indica la matrice Jacobiana relativa al profilo \mathbf{x}_{iter-1} e $\mathbf{n}_{iter-1} = \mathbf{S} - \mathbf{F}(\mathbf{p}, \mathbf{x}_{iter-1})$ il resto.

Per stabilire quando il valore ottenuto è sufficientemente vicino al minimo della funzione χ^2 è necessario adottare dei criteri di convergenza.

3.2.2 Metodo di Levenberg-Marquardt

La procedura descritta in precedenza che utilizza il metodo di Metodo di Gauss-Newton [12] riesce a ricavare una soluzione approssimata solo se il problema è quasi lineare. Se partiamo da una posizione di χ^2 distante dal minimo l'espansione al secondo ordine risulta essere una approssimazione povera per la forma della funzione e quindi la correzione calcolata può risultare sbagliata.

Per questo motivo il metodo di Gauss-Newton viene modificato utilizzando il metodo di Levenberg-Marquardt [13], il quale prevede l'introduzione di un fattore λ che riduce l'ampiezza del vettore delle correzione da apportare al parametro, secondo la formula:

$$\mathbf{x}_{iter} - \mathbf{x}_{iter-1} = (\mathbf{K}_{iter-1}^T \mathbf{V}_n^{-1} \mathbf{K}_{iter-1} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{K}_{iter-1}^T \mathbf{V}_n^{-1} \mathbf{n}_{iter-1}$$
(3.12)

Il fattore λ è inizializzato utilizzando un valore numerico predefinito che durante le iterazioni può decrescere quando decresce il valore di χ^2 e aumenta quando aumenta il valore di χ^2 . A convergenza il metodo di Levenberg-Marqardt fornisce la stessa soluzione che sarebbe ottenuta con un numero maggiore di iterazioni attraverso l'Eq. 3.11, ma con un numero minore di iterazioni.

3.2.3 Errore sui parametri

La quantità detta $\chi_{ridotta}$ ($\chi - test$) definita come:

$$\chi - test = \frac{\chi^2}{n - m} \tag{3.13}$$

dove n indica il numero di misure e m il numero di parametri ricavati, ha un valore di aspettazione pari a 1 [14]. Deviazioni della formula 3.13 dall'unità quantificano la capacità del modello diretto di riprodurre gli osservati e quindi dà una stima della bontà del modello di inversione utilizzato. L'errore associato alla soluzione del metodo di inversione è descritto dalla matrice di varianza-covarianza \mathbf{V}_x di \mathbf{x} data da:

$$\mathbf{V}_x = \mathbf{D}_c \mathbf{V}_n \mathbf{D}_c^T = (\mathbf{K}_c^T \mathbf{V}_n^{-1} \mathbf{K}_c)^{-1}$$
(3.14)

dove \mathbf{D}_c e \mathbf{K}_c sono rispettivamente la matrice soluzione e la matrice Jacobiana calcolate alla convergenza. La matrice \mathbf{V}_x descrive in che modo gli errori casuali rappresentati dalla matrice \mathbf{V}_n si riflettono nell'incertezza dei valori del parametro ricavato. La radice quadrata degli elementi sulla sua diagonale sono la deviazione standard (ESD) dei parametri corrispondenti.

Oltre a quelli sopra descritti è stato utilizzato anche lo strumento matematico detto "Information Load", che verrà presentato nel capitolo 4.4.1 dove viene applicato nel contesto della discussione.

Capitolo 4

FULL2D

4.1 Introduzione

Il modello di inversione dei dati, con il quale gli spettri misurati da MIPAS2k vengono convertiti nei valori dei parametri atmosferici di interesse, è chiamato FULL2D ed è scritto in linguaggio FORTRAN. Tale modello utilizza come base di partenza il modello di inversione di MIPAS, detto Geo-Fit [15, 16], ma si differenzia da questo per sfruttare al massimo le caratteristiche tecniche del nuovo strumento. Per studiare il modello FULL2D è necessario quindi comprendere appieno la strategia del Geo-Fit che verrà presentata nel capitolo seguente 4.2.

4.2 Geo-Fit

La strategia del Geo-Fit rende possibile descrivere le disomogeneità orizzontali utilizzando contemporaneamente tutte le osservazioni al lembo sull'intera orbita tramite una discretizzazione 2D dell'atmosfera. In questo modo ogni osservazione contribuisce a determinare la quantità incognita in più punti tra tutti quelli attraversati dalle linee di vista, riuscendo così ad utilizzare nel miglior modo possibile tutta l'informazione a disposizione.

Questa strategia sfrutta il fatto che le scansioni al lembo effettuate dallo strumento sono ripetute con continuità lungo tutto il piano dell'orbita (guardando all'indietro) e l'informazione di una regione atmosferica può essere raccolta utilizzando tutte le linee di vista che attraversano la regione stessa. Come si vede dalla Fig. 4.1 i punti di tangenza delle linee di vista di una scansione al lembo non sono disposti verticalmente, ma tendono ad occupare lo spazio della sequenza vicina, per tale motivo un utilizzo maggiore dell'informazione disponibile viene raggiunto analizzando contemporaneamente tutta l'informazione relativa alla porzione di atmosfera di interesse. Il migliore utilizzo complessivo lo si ottiene utilizzando contemporaneamente tutte le misure dell'intera orbita.



Figura 4.1: Linee di vista di una sequenza di scansioni al lembo. I punti rossi indicano i punti di tangenza della sequenza definita dalle linee di vista più le due adiacenti.

4.2.1 Microwindows

Data la grande quantità di informazione delle misure e la loro ridondanza, invece di considerare l'informazione portata da tutto lo spettro vengono analizzati degli stretti intervalli spettrali larghi fino ad un massimo di 3 cm^{-1} , detti Microwindows (MWs) [17], che contengono l'informazione ottimale sui parametri di interesse. Attraverso il loro utilizzo è possibile diminuire la propagazione degli errori sistematici trascurando le regioni spettrali caratterizzate da una elevata incertezza e di mantenere il problema dell'inversione dei dati all'interno di una dimensione accettabile dal punto di vista computazionale.

L'insieme delle MWs utilizzate per ricavare una data specie chimica sono disposte all'interno delle Matrici di Occupazione (OM) che sono, in genere, matrici con tante righe quante sono il numero di scansioni al lembo utilizzate in una sequenza e tante colonne quante sono le MWs utilizzate per determinare la molecola.

La scelta di quali MWs adottare per determinare le diverse molecole verrà descritto nel Cap. 4.4.

4.2.2 Look-Up Tables

I valori delle sezioni d'urto delle molecole atmosferiche impiegate non vengono calcolati direttamente, ma si utilizzano i valori precalcolati conservati in appositi files detti Look-Up Tables (LUTs) [18] permettendo di risparmiare così un notevole tempo di calcolo.

Le LUTs sono precalcolate in funzione della pressione e della temperatura; nel caso in cui il valore della sezione d'urto di interesse non sia tabulato il programma, effettua una interpolazione dei dati e calcola il valore cercato alla pressione e temperatura di interesse.

4.2.3 Aspetti geometrici del Modello diretto

Discretizzazione dell'atmosfera

Per considerare la variabilità verticale e orizzontale dei componenti atmosferici è stata adottata una discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera. La discretizzazione verticale è costituita da una serie di ellissoidi equispaziati a partire dalla superficie terrestre fino alla quota di 80 Km.

Per quanto riguarda la discretizzazione orizzontale vengono per prima cosa definiti una serie di raggi equispaziati in latitudine che hanno origine in centro della terra. Questi raggi identificano una serie di punti sull'ellissoide terrestre da cui vengono tracciati dei segmenti che si estendono perpendicolarmente alla superficie terrestre fino al limite esterno dell'atmosfera.

Il risultato di tale discretizzazione bidimensionale ricorda la forma di una ragnatela; l'intersezione tra i raggi e i livelli è detta nodo, mentre il singolo elemento della discretizzazione 2D è chiamato spicchio (Fig. 4.2).

Ray Tracing

La determinazione del cammino ottico delle linee di vista deve tener conto della descrizione bidimensionale dell'atmosfera.

La linea di vista parte dalla coordinata dello strumento con direzione definita dall'angolo di puntamento della geometria al lembo osservata. La linea prosegue in linea retta fino al limite esterno dell'atmosfera, da questo punto in poi ogni volta che la linea di vista interseca il perimetro di uno spicchio la sua direzione viene modificata per effetto della rifrazione, in accordo con la legge di Snell. La linea risulta quindi formata da una serie consecutiva di segmenti ognuno dei quali rappresenta il cammino ottico all'interno di uno spicchio. In Fig. 4.2 è mostrato, utilizzando una scala distorta, il percorso di una linea di vista all'interno dell'atmosfera utilizzando la discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera.



Figura 4.2: Discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera e ray tracing.

4.3 FULL2D razionale

Lo strumento MIPAS2k grazie alle sue caratteristiche tecniche è in grado di eseguire un numero elevato di scansioni al lembo per orbita con le quali, come vedremo, è possibile ottenere dei risultati di qualità nettamente superiori in termini di precisione e risoluzione spaziale rispetto a quelli ottenuti dallo strumento MIPAS. Da queste considerazioni preliminari ci aspettiamo che le risoluzioni spaziali verticali ed orizzontali dello strumento siano confrontabili con le dimensioni dello spicchio della discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera, per questo motivo il modello di inversione FULL2D di MIPAS2k si propone di ricavare i parametri finali non più sotto forma di profili verticali, ma come valori all'interno dello spicchio stesso. Con questa scelta la quantità determinata viene assunta omogenea all'interno dello spicchio; questa assunzione è giustificata se le dimensioni dello spicchio sono sufficientemente piccole da renderla accettabile.

Il procedimento attraverso cui è stata scelta la dimensione ottimale dello spicchio della discretizzazione bidimensionale viene riportato nel capitolo seguente 4.3.1.

4.3.1 Scelta della dimensione degli spicchi

Nel Geo-Fit i valori di P e T da associare allo spicchio erano ricavati utilizzando l'integrale di Curtis-Godson [19] con cui venivano calcolati con un integrale curvilineo lungo il cammino ottico all'interno dello spicchio. Il modello di inversione FULL2D invece utilizza l'approssimazione di atmosfera omogenea all'interno dello spicchio, questa scelta si riflette nel procedimento di inversione dei dati cambiando le proprietà radiative dello spicchio attraverso valori diversi di pressione e temperatura nel modello diretto.

Per capire in che modo l'utilizzo del valore medio all'interno dello spicchio si riflette nei valori degli spettri calcolati, si sono studiati diversi tipi di discretizzazione dell'atmosfera con separazione dei livelli in altezza comprese tra $0.5 \ Km$ e $2 \ Km$ e separazione tra due raggi consecutivi tra 0.25° e 1° di latitudine. Dai risultati ottenuti si è notato che la separazione tra due raggi consecutivi non influenza il risultato finale e per questo motivo la separazione tra i raggi è stata posta uguale a 1° di latitudine per tutti i casi studiati.

Nella Fig. 4.3 sono confrontati gli spettri di emissione alle medie latitudini ricavati con le MWs di MIPAS2k per la molecola di O_3 utilizzando il modello diretto con l'approssimazione del valore medio all'interno dello spicchio (FULL2D) e quelli con l'utilizzo dell'integrale di Curtis-Godson (Geo-Fit). Il pannello superiore mostra i due spettri ricavati con una discretizzazione che utilizza una separazione dei livelli verticali di 2 Km e dei raggi di 1°. In quello inferiore sono mostrate le differenze della radianza tra i due spettri mostrati sopra in funzione della quota di tangenza. Nel pannello inferiore con due linee blu orizzontali sono segnati i livelli di intensità di $|1 nW/(cm^2 sr cm^{-1})|$ che rappresentano il NESR dello strumento. Come si può notare dalla figura, gli spettri hanno una buona sovrapposizione nell'intervallo di quote compreso tra il limite esterno dell'atmosfera fino ai $15 \ Km$ di quota, dove la differenza non supera il livello di rumore dello strumento. Sotto i 15 Km di quota la differenza tra i due spettri supera abbondantemente il rumore spettrale, utilizzando tale discretizzazione dell'atmosfera quindi l'assunzione di omogeneità all'interno dello spicchio introduce distorsioni che superano il livello di rumore. Quindi per determinare il tipo di discretizzazione opportuno da adottare nel modello FULL2D sono state analizzati diversi tipi di discretizzazione. Nella Fig. 4.4 sono mostrate le differenze degli spettri nell'intervallo di quote compreso tra 28 - 6 Km ottenuti utilizzando differenti tipi di discretizzazione. Nei tre casi la separazione dei raggi è sempre uguale a 1° di latitudine, mentre la separazione dei livelli verticali è di 2 Km, 1 Km e 0.5 Km rispettivamente. Come si vede nella Fig. 4.4 la differenza tra gli spettri diminuisce al diminuire della spaziatura verticale adottata e per una discretizzazione che utilizza una spaziatura verticale di 0.5 Km, la differenza tra le due approssimazioni rimane sotto il livello di rumore di 1 $nW/(cm^2 \ sr \ cm^{-1})$ per tutto l'intervallo di quote coperto dalle misure. Alla luce di questi risultati nel modello di inversione dei dati FULL2D si è deciso di utilizzare una discretizzazione bidimensionale con tali caratteristiche, ossia con separazione dei raggi di 1° di latitudine e separazione dei livelli verticali di 0.5 Km.

Gli stessi risultati descritti in precedenza, ricavati alle medie latitudini, sono validi anche per le altre latitudini.


Figura 4.3: Nel pannello superiore sono mostrati i due spettri ricavati utilizzando il modello diretto con l'approssimazione del valore medio all'interno dello spicchio e con l'utilizzo dell'integrale di Curtis-Godson con una discretizzazione che utilizza una separazione dei livelli verticali di 2 Km e dei raggi di 1°. In quello inferiore è mostrata la differenza della radianza tra i due spettri del pannello superiore in funzione della quota di tangenza; le due linee orizzontali blu indicano i livelli di intensità di $|1 nW/(cm^2 srcm^{-1})|$ che rappresentano il NESR dello strumento.



Figura 4.4: Le curve colorate mostrano le differenze della radianza ottenuta, allo stesso modo della figura precedente, al variare della spaziature verticale dei livelli. La linea rossa indica la differenza ottenuta con una spaziatura di 2Km, quella verde di 1Km e quella azzurra di 0.5Km.

4.4 Scelta delle Microwindows

In questo capitolo verrà descritto il procedimento attraverso cui sono state scelte le MWs da associare ad ogni specie chimica da utilizzare nel FULL2D per analizzare le misure di MIPAS2k. La scelta è stata effettuata tramite l'utilizzo dello strumento "Information Load" (IL) [20] con il quale è possibile descrivere la quantità di informazione sulla grandezza da determinare portata da ogni spicchio.

Per rendere confrontabili i risultati ottenuti con le due risoluzioni dello strumento $(0.2 \ cm^{-1} \ e \ 0.1 \ cm^{-1})$, si è deciso di scegliere un set di MWs per ogni molecola in modo tale da ottenere un numero di punti spettrali per sequenza analogo per le due risoluzioni.

4.4.1 Information Load

L'Information Load è un valore scalare, indicato con (Ω) , che misura la quantità di informazione portata da ogni spicchio del parametro da determinare.

Come si può intuire l'Information Load di un determinato spicchio dipende dal numero di geometrie di osservazione che lo intersecano, detto molteplicità e dall'equazione del trasferimento radiativo. Per determinare l'IL è utile definire la funzione di sensibilità (SF) delle osservazioni nel dominio verticale [21] come:

$$\phi(z,\tilde{\nu},x) = \left[\frac{\partial S(\tilde{\nu},x)}{\partial q_z}\right]$$
(4.1)

dove $S(\nu, x)$ è il segnale misurato dallo strumento alla frequenza $\tilde{\nu}$, q_z è il valore del parametro atmosferico q all'altezza z che emette alla frequenza $\tilde{\nu}$ e x indica i parametri di osservazione. Per ogni osservazione definita dai parametri (z, x) la funzione ϕ misura la sensibilità delle osservazioni ad una variazione del parametro atmosferico q in funzione della quota. La funzione ϕ fornisce, per una data altitudine, una stima della quantità di informazione portata da una particolare osservazione rispetto al parametro di interesse.

In modo analogo la SF può essere calcolata nel dominio orizzontale [21]:

$$\Phi(\theta, \tilde{\nu}, x) = \left[\frac{\partial S(\tilde{\nu}, x)}{\partial q_{\theta}}\right]$$
(4.2)

dove q_{θ} è il valore del parametro atmosferico q alla coordinata orbitale θ . La coordinata orbitale (OC) è la coordinata angolare θ relativa al sistema di riferimento avente l'origine nel centro della terra e $\theta = 0$ al polo nord. Analogamente all'Eq. 4.1, Φ fornisce in funzione di θ la quantità di informazione portata da una partico-lare osservazione rispetto al parametro di interesse.

Le SF definite dalle Eq. 4.1 e 4.2 sono definite considerando una distribuzione del parametro di interesse in una sola dimensione. Dall'Eq. 3.9 si nota che le righe della matrice Jacobiana **K** possono essere viste come una forma discreta della SF. Spostandoci quindi nel dominio bidimensionale la SF deve essere definita considerando la distribuzione spaziale dei parametri atmosferici utilizzata nel FULL2D:

$$\omega(h,\tilde{\nu},x) = \left[\frac{\partial S(\tilde{\nu},x)}{\partial q_h}\right] \tag{4.3}$$

dove h è lo spicchio della discretizzazione 2D dell'atmosfera e q_h è il valore medio del parametro q all'interno dello spicchio h. L'Eq. 4.3 rappresenta il punto di partenza per la definizione della quantità di informazione totale portata da tutte le osservazioni in ogni spicchio della discretizzazione 2D dell'atmosfera. Come detto in



Figura 4.5: Illustrazione della molteplicità di uno spicchio derivante da 3 geometrie di osservazione.

precedenza ogni spicchio è attraversato da un numero di geometrie d'osservazione che definisce la molteplicità dello spicchio, un esempio è mostrato in Fig. 4.5. Inoltre le osservazioni di MIPAS2k sono effettuate utilizzando un set di MWs in cui tutti i punti spettrali contribuiscono ad accumulare informazione. Da queste considerazioni ad ogni spicchio può essere assegnata una grandezza scalare detta "Information Load" (IL) che rappresenta la quantità di informazione con cui lo spicchio contribuisce alla misura. L'IL dello spicchio è il risultato combinato dell'informazione portata dagli elementi spettrali delle MWs e dal numero di geometrie di osservazione che definiscono la sua molteplicità. Questa quantità indicata con Ω , è definita come:

$$\Omega(h,q) = \left[\sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial S_{ijk}}{\partial q_h}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}$$
(4.4)

dove:

- $\Omega(h,q)$ rappresenta l'Information Load dello spicchio h rispetto al parametro atmosferico q;
- S_{ijk} è il segnale spettrale ricavato dalla geometria di osservazione *i* alla frequenza *j* della MW *k*;
- *l* è il numero delle geometrie di osservazione che determinano il valore della molteplicità dello spicchio *h*;
- m è il numero di MWs analizzate nella geometria di osservazione i;
- n è il numero di punti spettrali nella MW j.

Nell'Eq. 4.4 è stata adottata la regola della somma quadratica (per determinare i contributi alle singole osservazioni) poichè il vettore colonna contenente i valori dei parametri all'interno della tripla somma è la matrice Jacobiana \mathbf{K} corrispondente al parametro q nello spicchio h e l'equazione può essere scritta come:

$$\Omega(h,q) = \left[(\mathbf{K}^T \mathbf{K})_h \right]^{\frac{1}{2}}$$
(4.5)

dove **K** contiene le derivate delle osservazioni rispetto al parametro q nello spicchio h.

4.4.2 Selezione delle MWs per MIPAS2k

Le Microwindows utilizzate per MIPAS2k sono state selezionate in diverso modo in base alla loro disponibilità. Per quanto riguarda le MWs della molecola di ozono con risoluzione $0.2 \ cm^{-1}$ sono state utilizzate quelle adottate dallo strumento IRLS, mentre in tutti gli altri casi non avevamo MWs disponibili da utilizzare.

Le MWs delle molecole di H_2O , HNO_3 e N_2O per la risoluzione 0.2 cm^{-1} sono state create utilizzando lo stesso algoritmo con cui erano state create le MWs di IRLS per l' O_3 , mentre le MWs per risoluzione 0.1 cm^{-1} sono state scelte tra quelle utilizzate da MIPAS per il modo d'osservazione "S6".

A questo punto per ogni molecola e per ogni risoluzione spettrale avevamo a disposizione un numero di MWs variabile tra 4 e 6, ognuna delle quali caratterizzata da un determinato intervallo spettrale, un intervallo di quote in cui agisce e un numero di punti spettrali per sequenza. Non potevano essere utilizzate tutte per limitare la richiesta di calcolo, per questo motivo sono state selezionate un numero inferiore tra quelle disponibili. Di seguito verrà riportato come esempio il procedimento con cui sono state scelte le MWs dell' O_3 fra le 4 disponibili per la risoluzioni spettrale di $0.1 \ cm^{-1}$. Un procedimento analogo è stato effettuato per gli altri casi.

Per prima cosa sono state create le mappe di distribuzione dei valori dell'Information Load (in funzione di *h* e OC) relative alle singole MWs. I risultati ottenuti sono riportati in Fig 4.6. Come si vede dalla figura l'informazione che si ricava da ogni MW ha una distribuzione spaziale caratteristica, questo dipende dall'intervallo di quote in cui agisce e dal particolare intervallo spettrale in cui la MW opera. Sotto ogni mappa è riportato il nome della rispettiva MW ed il valore massimo dell'Information Load. Nella tabella 4.1 sono riportate le caratteristiche delle MWs della Fig. 4.6 con indicati i rispettivi intervalli spettrali, intervalli di quote in cui agiscono e i punti spettrali per sequenza.

Per scegliere quali, tra le 4 MWs disponibili, utilizzare sono stati presi in considerazione diversi fattori. Il primo consisteva nell'ottenere il massimo di omogeneità e copertura spaziale in tutto l'intervallo di quote di nostro interesse (6-54 Km). Si è poi tenuto conto anche del fatto che il numero di punti spettrali per sequenza delle MWs scelte per una determinata molecola doveva essere simile nelle due risoluzioni spettrali per poter ottenere dei risultati confrontabili. Osservando la distribuzione spaziale dell'IL delle singole MWs e sapendo che le MWs utilizzate con risoluzione $0.2 \ cm^{-1}$ per l'ozono, definite per IRLS, fornivano un numero di punti spettrali per sequenza pari a 616, si è deciso di utilizzare le MWs 0161 e 0163 che assieme forniscono un numero di punti spettrali per sequenza pari a 610. Dalla Fig 4.6 si nota che la distribuzione spaziale dell'informazione portata dalle due MWs è complemen-



Figura 4.6: Mappe dell'Information Load in funzione di he OC ottenute utilizzando le singole MWs

MW	intervallo spettrale (cm^{-1})	intervallo di altezze (Km)	punti spettrali per sequenza
0161	673.3-675.9	6.0-54.0	418
0162	757.5-760.5	16.0-35.0	216
0163	1125.4-1128.4	6.0-22.0	192
0164	769.2-772.2	10.0-28.0	167

Tabella 4.1: Caratteristiche delle MWs disponibili per la risoluzione 0.1 cm^{-1} della molecola di Ozono.

tare; la 0161 porta informazione in particolare sopra la troposfera fino a circa 40 Km, mentre la 0163 porta informazione anche sotto la troposfera e sopra i 40 Km di quota.

L'Information Load ottenuto utilizzando assieme le MWs 0161 e 0163 è mostrato in Fig. 4.7.



Figura 4.7: Mappa dell'Information Load ottenuta utilizzando le MWs 0161 e 0163.

In modo analogo al procedimento sopra descritto sono state scelte tutte le MWs utilizzate nel nostro studio. In tabella 4.2 sono riportate le MWs scelte per ogni molecola e risoluzione spettrale. Per ogni MW è riportato il nome, l'intervallo spettrale e di quote in cui agisce, mentre per ogni risoluzione spettrale di una molecola è riportato il numero totale di punti per sequenza.

Dalla tabella 4.2 si nota che, in generale, per ogni molecola analizzata per la risoluzione di $0.1 \ cm^{-1}$ vengono utilizzate meno MWs rispetto alla risoluzione $0.2 \ cm^{-1}$. Questo si spiega con il fatto che le MWs con risoluzione spettrale di $0.1 \ cm^{-1}$, data la loro risoluzione migliore, sono caratterizzate da un numero maggiore di punti spettrali per sequenza e da un valore massimo dell'Information Load maggiore rispetto al caso con risoluzione $0.2 \ cm^{-1}$. Per rendere confrontabili i risultati ottenuti per le due risoluzioni in generale è stato quindi necessario utilizzare un numero inferiore di MWs con risoluzione spettrale di $0.1 \ cm^{-1}$. Questa scelta dovrà essere considerata quando saranno confrontati i risultati ricavati dallo strumento MIPAS2k per le due risoluzioni spettrali adottate.

molecola	risoluzione spettrale (cm^{-1})	MW	intervallo spettrale (cm^{-1})	intervallo di altezze (Km)	punti spettrali per sequenza
<i>O</i> ₃	0.2	8401 8402	722.4 - 726.6 996.6 - 1000.8	13.7 - 54.1 6.0 - 19.3	616
	0.1	0161 0163	673.3 - 675.9 1125.4 - 1128.4	6.0 - 54.0 6.0 - 22.0	610
H ₂ O	0.2	8401 8402 8403 8405	1450.6 - 1454.8 1205.0 - 1209.2 1499.6 - 1503.8 1551.8 - 1556.0	9.5 - 50.1 6.0 - 12.3 10.9 - 50.1 9.5 - 49.4	1364
	0.1	0161 0162 0164	1649.8 - 1652.8 824.7 - 827.7 1392.4 - 1395.4	15.0 - 68.0 6.0 - 30.0 10.0 - 35.0	1378
HNO ₃	0.2	0001 0002 0003 0004	875.8 - 880.8 895.2 - 900.2 861.2 - 866.2 881.8 - 866.8	6.0 - 50.1 6.0 - 50.1 10.2 - 47.3 6.0 - 50.1	521
	0.1	0161	876.4 - 879.4	6.0 - 50.0	518
N ₂ O	0.2	0001 0002 0003 0004 0005	1600.6 - 1605.6 1606.6 - 1611.0 1611.2 - 1616.2 1595.4 - 1600.4 825.8 - 826.8	8.8 - 50.1 8.8 - 50.1 8.8 - 50.1 8.1 - 50.1 6.0 - 17.9	548
	0.1	0162 0163	1232.8 - 1235.7 1271.7 - 1274.6	6.0 - 28.0 14.0 - 50.0	624

Tabella 4.2: Caratteristiche e punti spettrali per sequenza delle MWs scelte per ogni molecola e risoluzione spettrale.

Capitolo 5

Razionale per i retrieval su osservati simulati

MIPAS2k è lo strumento presentato e studiato in questo elaborato. Trattandosi di uno strumento ipotetico non esistono misure con cui poter determinare le sue caratteristiche, per questo motivo sono stati creati gli osservati simulati di MIPAS2k a partire dai quali, utilizzando il modello FULL2D, è stato possibile ricavare le distribuzioni spaziali dei parametri finali di interesse. L'analisi dei risultati ricavati attraverso questo procedimento ha permesso di determinare le caratteristiche del nuovo strumento, quali: la precisione dei prodotti, la copertura spaziale e la risoluzione spaziale.

I passaggi fondamentali nello studio dello strumento attraverso l'utilizzo degli osservati simulati sono:

- Definizione dell'orbita dello strumento e dei parametri delle geometrie di osservazione. Per quanto riguarda l'orbita si è deciso di utilizzare l'orbita standard (30598) percorsa dal satellite ENVISAT durante la sua missione.
- 2. Creazione degli osservati simulati dallo strumento su tutta l'orbita utilizzando il modello diretto del trasferimento radiativo a partire da un'atmosfera di riferimento di cui si conoscono le caratteristiche chimico-fisiche (vedi Cap. 5.1.2). Per fare in modo che gli spettri calcolati non risentano dell'assunzione di omogeneità nello spicchio il modello diretto utilizza l'integrale di Curtis-Gosdson per calcolare i valori di P e T. Agli osservati simulati ottenuti in questo modo viene aggiunto un rumore spettrale casuale definito dallo scarto

quadratico medio del rumore previsto per lo strumento MIPAS2k (vedi Tab. 2.3).

- 3. Gli osservati simulati nel passaggio precedente vengono analizzati dal modello FULL2D per ricavare i valori dei parametri all'interno della discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera. In questo passaggio l'initial guess viene preso dai campi dell'atmosfera base IG2 (Cap. 5.1.1).
- 4. I parametri finali sono confrontati con i valori dell'atmosfera di riferimento (quella usata per creare gli osservati simulati) (Cap. 6), determinando così le caratteristiche di precisione dello strumento.
- 5. Le risoluzioni verticali ed orizzontali di MIPAS2k sono studiate attraverso l'utilizzo di un metodo perturbativo del valore ricavato sul singolo spicchio nella discretizzazione 2D dell'atmosfera (Cap. 6.3).

Questa procedura è stata applicata a tutti i target definiti nel capitolo 1: O_3 , H_2O , $HNO_3 \in N_2O$.

5.1 Modelli atmosferici

5.1.1 IG2

La stima iniziale dell'atmosfera utilizzata dal modello diretto è generalmente ricavato a partire da un'atmosfera derivata dalla climatologia chiamata IG2 (initial guess atmosphere) [22]. In questo modello le caratteristiche di ogni quantità sono riportate per 6 bande latitudinali per le quattro stagioni tramite 12 profili verticali sul piano orbitale. Tale atmosfera fornisce i valori lungo l'intera orbita della pressione, temperatura e VMR dei costituenti atmosferici integrati con le sezioni d'urto del continuo atmosferico.

Nelle atmosfere di riferimento i valori dei VMRs e della temperatura sono calcolati interpolando i valori dei profili sulle posizioni dei nodi della discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera. Lo stesso procedimento è effettuato per ricavare i valori sui nodi della pressione nel dominio orizzontale, mentre nel dominio verticale viene assunta una variazione esponenziale con la quota. Per quanto riguarda il continuo atmosferico viene utilizzata una regola di interpolazione uguale a quella per la pressione.

5.1.2 Atmosfere di riferimento ECMWF e EMAC

Abbiamo preso in considerazione due modelli di atmosfera: ECMWF [23] e EMAC [24]. Le caratteristiche chimico-fisiche delle atmosfere di riferimento utilizzate per creare gli osservati simulati di MIPAS2k sono tabulate in appositi files e descritte tramite profili verticali dei parametri atmosferici di interesse. I profili verticali sono 320 equispaziati di 1.125° per l'atmosfera ECMWF, mentre sono 256 spaziati ad intervalli irregolari di latitudine, compresi tra 1° e 1.4°, per EMAC. La scelta di quale tra le due atmosfere utilizzare, è stata dettata dalla presenza nel modello del target che volevamo analizzare. Se per una molecola analizzata erano disponibili entrambe, come per il caso di H_2O ed O_3 , la scelta è ricaduta nell'atmosfera ECMWF in quanto è più dettagliata. Le molecole di HNO_3 e N_2O invece sono disponibili solo per l'atmosfera EMAC e per questo motivo nel calcolo degli osservati simulati è stato necessario adottare quest'ultima.

L'utilizzo delle atmosfere di riferimento permette il confronto tra i risultati ottenuti e l'atmosfera a partire da cui sono stati creati gli osservati simulati. Per poter quantificare la differenza tra i valori finali ricavati dal modello di inversione dei dati FULL2D e i valori dell'atmosfera di riferimento utilizzata per creare gli osservati simulati, i parametri atmosferici di quest'ultima devono essere descritti utilizzando la stessa griglia bidimensionale in cui vengono ricavati i risultati. A questo scopo per prima cosa viene effettuata un'interpolazione dei profili dell'atmosfera di riferimento sui vertici degli spicchi della discretizzazione bidimensionale. I valori sui quattro vertici di ogni spicchio sono mediati ottenendo i valori del parametro da associare allo spicchio stesso.

Capitolo 6

Risultati dei retrievals e discussione

I risultati ricavati a partire dagli osservati simulati dello strumento MIPAS2k attraverso il modello di inversione FULL2D sono stati analizzati utilizzando opportuni grafici e quantificatori. L'obbiettivo di questa analisi è stato quello di valutare la performance dello strumento MIPAS2k e di determinarne alcune caratteristiche quali la precisione dei prodotti e la copertura spaziale. Si è poi studiato come variano queste caratteristiche delle specie considerate nei due modi d'osservazione considerati, ovvero al variare del campionamento orizzontale delle misure, e della risoluzione spettrale utilizzata dallo strumento.

Per determinare la copertura spaziale e la precisione dei prodotti i valori ricavati dei VMR delle molecole analizzate sono stati visualizzati attraverso delle mappe, in cui vengono rappresentate le distribuzioni spaziali del VMRs in funzione della quota e della coordinata orbitale. Per ogni molecola studiata (O_3 , H_2O , HNO_3 e N_2O) sono state utilizzate anche altre quantità ricavate (visualizzate tramite mappe) (Cap. 6.1).

Le mappe permettono di determinare solo in modo qualitativo le caratteristiche dei prodotti dello strumento, per questo motivo sono stati utilizzati degli appositi quantificatori che permettono di dare una descrizione quantitativa, purchè approssimata, dei risultati ottenuti. L'utilizzo dei quantificatori permette inoltre un confronto diretto delle prestazioni ottenute dai due modi d'osservazione dello strumento MIPAS2k (Cap. 6.2). Infine sono state studiate le risoluzioni verticali ed orizzontali di MIPAS2k attraverso l'utilizzo di un metodo perturbativo del valore del VMR della molecola di ozono ricavato sul singolo spicchio nella discretizzazione 2D dell'atmosfera (Cap. 6.3).

6.1 Mappe

Le mappe riportate di seguito per ogni molecola sono state create utilizzando alcuni software grafici, scritti con il linguaggio di programmazione IDL, che permette di elaborare e graficare i risultati ottenuti. Per ogni molecola studiata e risoluzione verranno mostrate le mappe delle seguenti quantità:

- <u>riferimento</u>, rappresenta la distribuzione del VMR dell'atmosfera di riferimento utilizzata per creare gli osservati simulati con la discretizzazione bidimensionale utilizzata dal FULL2D (Cap. 5.1.2);
- <u>inital guess</u>, VMR dell'atmosfera IG2 utilizzata come stima iniziale del target dal modello diretto all'interno del FULL2D, descritta utilizzando la discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera (Cap. 5.1.1);
- <u>ricavati</u>, VMR ricavati dal FULL2D analizzando gli osservati simulati dello strumento.
- <u>differenze</u>, differenze tra i valori ricavati e quelli dell'atmosfera di riferimento utilizzata per creare i simulati osservati. Questa mappa permette di quantificare in che modo il modello FULL2D riesce a ricostruire la distribuzione spaziale dei parametri.

Nel capitolo 6.2.1 verranno anche mostrate le mappe dei valori delle differenze percentuali del VMR nei singoli spicchi per comodità nella discussione.

Di seguito per ogni specie chimica esaminata e risoluzione spettrale vengono riportate e discusse le mappe sopra descritte.

6.1.1 O_3

Nella Fig. 6.1 sono mostrate le mappe descritte nel capitolo precedente relative al VMR della molecola di ozono per le due risoluzioni spettrali considerate. Le mappe del riferimento e dell'initial guess sono le stesse per le due risoluzioni di MIPAS2k perchè l'atmosfera di riferimento utilizzata per creare gli osservati simulati e l'atmosfera initial guess sono le medesime. Nella stessa figura sono riportate anche le mappe dei ricavati ottenute per il modo "nominale" (con risoluzione spettrale $0.2 \ cm^{-1}$) e con il modo "S6" (con risoluzione $0.1 \ cm^{-1}$). Confrontando visivamente queste due mappe con la mappa del riferimento si nota che il modello FULL2D riesce a riprodurre bene la distribuzione spaziale del VMR dell'atmosfera di riferimento. A prima vista, non si notano differenze tra le mappe dei ricavati ottenute con i due diversi modi d'osservazione. Per confrontare i risultati ottenuti con le due risoluzioni è necessario osservare le mappe delle differenze in cui si vede che per entrambi i casi il modello di inversione dei dati commette degli errori, in generale al di sotto di 0.5 ppmv. Si nota inoltre che per la risoluzione spettrale di $0.1 \ cm^{-1}$ le deviazioni tra i ricavati e il riferimento sono più marcate e diffuse in particolare per le quote al di sopra dei 50 Km. Questo può indicare che il modello FULL2D riesce a ottenere delle misure più precise e con una copertura spaziale migliore quando lo strumento utilizza il modo d'osservazione "nominale", privilegiando il passo di campionamento dell'atmosfera rispetto alla risoluzione spettrale. Per quanto riguarda la zona sopra i 50 Km, come si noterà in seguito, il modello di inversione commette degli errori maggiori nel modo "S6" rispetto al modo "nominale" in tutti i target analizzati. Questo perchè, come detto nel Cap. 2.1, il modo d'osservazione "S6" e le relative MWs sono state create per MIPAS per lo studio della regione atmosferica detta "Upper Troposphere/Lower Stratosphere" (UTLS) (vedi tabella 2.2).



Figura 6.1: Mappe del riferimento, initial guess, ricavati e differenze per i due modi d'osservazione per la molecola di ozono.

6.1.2 H_2O

Nella Fig. 6.2 sono mostrate le mappe relative al VMR della molecola di acqua per le due risoluzioni spettrali. Osservando le mappe del riferimento e del ricavato si può apprezzare la distribuzione caratteristica del VMR dell'acqua in atmosfera, in particolare il suo aumento esponenzialmente al calare della quota al di sotto della tropopausa. Dalle mappe delle differenze si nota che, sopra la tropopausa, il modello riesce a ricavare la distribuzione del VMR con un errore dell'ordine di 1 ppmv in entrambi i modi di osservazione dello strumento. Sotto la tropopausa invece l'errore è costantemente elevato perchè il modello FULL2D non riesce a riprodurre bene la distribuzione spaziale del VMR dell'atmosfera di riferimento a causa della brusca crescita del VMR dell'acqua che rende opaca l'atmosfera in seguito all'allargamento per pressione delle sue numerose forme spettrali. Dai grafici delle differenze si nota inoltre che nel modo "S6" si ricava meglio il VMR dell'acqua al di sopra dei 30 Km. Questo è dovuto al fatto che le MWs selezionate per la molecola d'acqua con risoluzione 0.1 cm^{-1} portano maggiore informazione al di sopra di tale quota rispetto a quelle selezionate per la risoluzione di $0.2 \ cm^{-1}$, come abbiamo verificato analizzando le mappe (non riportate) dell'IL (vedi Cap. 4.4).



Figura 6.2: Mappe del riferimento, initial guess, ricavati e differenze per i due modi d'osservazione per la molecola di acqua.

6.1.3 *HNO*₃

Nella Fig. 6.3 sono mostrate le mappe relative al VMR della molecola di acido nitrico per le due risoluzioni spettrali. Le mappe dell' HNO_3 come si vede dal fondo scala sono caratterizzate da bassi valori del VMR e il FULL2D ricava la sua distribuzione commettendo un errore inferiore a 1 pptv in entrambe le risoluzioni. In questo caso le mappe dei ricavati e delle differenze mostrano che per la risoluzione di $0.2 \ cm^{-1}$ i risultati sono migliori rispetto alla risoluzione $0.1 \ cm^{-1}$. Bisogna ricordare però (vedi tabella 4.2) che per la molecola di HNO_3 le MWs selezionate per il modo "nominale" sono quattro mentre per il modo "S6" solo una, per avere un numero di punti spettrali per sequenza confrontabili nei due casi. Dato che ogni MWs è definita in un intervallo spettrale che fornisce informazione ottimale in uno specifico intervallo di quote, nel caso dell""S6" l'utilizzo di una sola MW non riesce a ricavare informazione in modo omogeneo su tutto l'intervallo di quote. Questo si ripercuote in un risultato peggiore quando lo strumento opera nel modo d'osservazione "S6" rispetto a quello "nominale".



Figura 6.3: Mappe del riferimento, initial guess, ricavati e differenze per i due modi d'osservazione per la molecola di acido nitrico.

6.1.4 N_2O

Nella Fig. 6.4 sono mostrate le mappe relative al VMR della molecola di protossido di azoto per le due risoluzioni spettrali. Questa molecola presenta un gradiente verticale del VMR come nel caso dell'acqua (Fig. 6.4), ma di entità inferiore. Dalle mappe delle differenze si vede infatti che il modello di inversione FULL2D riesce a ricavare la distribuzione dell' N_2O per entrambe le risoluzioni spettrali commettendo un'errore massimo di 0.05 ppmv anche nella regione atmosferica caratterizzata dal gradiente verticale della distribuzione del VMR. Le mappe mostrano inoltre che il FULL2D riesce ad ottenere dei risultati migliori nel caso della risoluzione $0.2 \ cm^{-1}$, specialmente sotto 20 Km e sopra 40 Km di quota, rispetto al caso con risoluzione $0.1 \ cm^{-1}$. Come detto per l'ozono questo può indicare che il numero delle misure effettuate dallo strumento è una caratteristica più importante rispetto alla risoluzione spettrale utilizzata per ottenere dei risultati con una buona precisione.



Figura 6.4: Mappe del riferimento, initial guess, ricavati e differenze per i due modi d'osservazione per la molecola di protossido di azoto.

6.2 Quantificatori

Per ottenere un confronto dei risultati ottenuti che non sia puramente qualitativo come quello fatto attraverso l'analisi delle mappe, sono stati utilizzati dei quantificatori che rappresentano in modo quantitativo i risultati ottenuti per una data molecola e risoluzione spettrale. I quantificatori rappresentano il valore medio delle grandezze ricavate sugli spicchi della discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera in un intervallo di quote dove principalmente è distribuita la molecola che stiamo analizzando (vedi colonna 2 tabella 6.1). I quantificatori utilizzati sono:

a)

$$AVE[|ret - ref|_{tot}] = \frac{\sum_{i=1}^{N} |ret_i - ref_i|}{N}$$
(6.1)

dove i indica l'indice dello spicchio considerato ed N è il numero totale di spicchi compresi nell'intervallo di quote in esame. Questa quantità esprime la somma, nell'intervallo di quote di interesse di una determinata molecola, delle differenze in valore assoluto tra i valori del VMR ricavati e di riferimento di ogni spicchio mediata sul numero totale di spicchi su cui si effettua la somma. In tal modo si ottiene la deviazione media tra il valore ricavato e quello di riferimento di ogni spicchio;

b)

$$AVE[|ret - ref|_{tot}]\% = \frac{\sum_{i=1}^{N} (|ret_i - ref_i|/|ref_i|)}{N} \times 100$$
 (6.2)

differenza media percentuale tra il valore del VMR ricavato e quello di riferimento. Il suo impiego è utile perché, a differenza del quantificatore precedente, permette di confrontare i valori ottenuti da molecole con diversi ordini di grandezza delle distribuzioni atmosferiche del VMR.

Di seguito, in tabella 6.1, vengono riportati i valori dei quantificatori per ogni molecola e risoluzione spettrale di cui sono state mostrate le mappe. Come si vede dalla tabella i valori di $AVE[|ret - ref|_{tot}]$ per ogni molecola sono sempre maggiori quando lo strumento utilizza il modo d'osservazione "S6" rispetto a quello "nominale" per determinare la distribuzione dei VMR. Questo conferma le impressioni ottenute os-

molecola	quote (Km)	risoluzione spettrale (cm^{-1})	$AVE[ret - ref _{tot}] $ (ppmv)	$AVE[ret - ref _{tot}]\%$	punti spettrali per orbita
<i>O</i> ₃	15 - 45	0.2	0.14	4.53%	247016
		0.1	0.18	5.71%	122610
H_2O	6 - 45	0.2	12.92	35.36%	546964
		0.1	19.50	38.16%	276978
HNO ₃	8 - 38	0.2	$3.21 \cdot 10^{-4}$	142.58%	208921
		0.1	$6.74 \cdot 10^{-4}$	166.15%	104118
N_2O	6 - 45	0.2	$1.02 \cdot 10^{-2}$	52.60%	219748
		0.1	$1.57 \cdot 10^{-2}$	181.58%	125424

Tabella 6.1: Valori dei quantificatori descritti dalle Eq. 6.1 e 6.2 per ogni molecola, intervallo di quota, risoluzione spettrale e punti spettrali analizzati nell'orbita.



Figura 6.5: Mappe delle differenze percentuali del VMR nei singoli spicchi ottenute per il modo "nominale" per i quattro target considerati.

servando le mappe. L'ultima colonna della tabella riporta il numero totale di punti spettrali dell'orbita per comodità nella discussione.

6.2.1 Discussione

I risultati riportati in tabella 6.1 confermano che, adottando il criterio di un ugual numero di punti spettrali per sequenza, l'utilizzo di un campionamento più fitto delle misure con una risoluzione inferiore permette di ottenere dei risultati con una copertura spaziale e precisione migliore rispetto a quelli utilizzando la metà della campionatura con risoluzione spettrale doppia. Bisogna anche considerare il fatto, come già detto in precedenza, che nel modo d'osservazione "nominale" a parità di punti spettrali sono state utilizzate in generale più MWs ognuna delle quali è caratterizzata da un intervallo spettrale che fornisce informazione ottimale in uno specifico intervallo di quote. Questo permette di ottenere dei risultati con una copertura verticale migliore quando lo strumento opera nel modo d'osservazione "nominale" spettrale delle misure nel modo d'osservazione "S6" è maggiore di un fattore $\sqrt{2}$ rispetto al modo "nominale" in conseguenza della risoluzione spettroscopica dimezzata (vedi tabella 2.3).

Tutti questi fattori permettono di ottenere dei risultati, in termini di precisione e copertura spaziale, migliori nel caso in cui le misure dello strumento vengano effettuate con il modo d'osservazione "nominale" rispetto al modo d'osservazione speciale "S6". Occorre rimarcare il fatto che con la scelta di un numero di punti confrontabili per sequenza abbiamo un numero totale di punti per orbita (vedi tabella 6.1) che differiscono di un fattore circa 2. Questa scelta ha anche un impatto sulle risorse di calcolo necessarie.

I valori delle differenze percentuali riportati in colonna 5 della tabella 6.1, così elevati per HNO_3 e N_2O , sono dovuti al fatto che queste due molecole presentano valori bassi nella loro distribuzione del VMR. In più, nell'intervallo di quote in cui sono calcolate (vedi tabelle 6.1), la distribuzione non è uniforme, ma presenta regioni dove tali specie sono quasi assenti. I risultati ottenuti con il quantificatore 6.2 (colonna 5 della tabella 6.1) risultano quindi poco significativi.

Per un migliore valutazione della precisione ottenuta per i diversi target in Fig. 6.5 vengono riportate le mappe delle differenze percentuali del VMR nei singoli spicchi, ottenute per il modo "nominale". Dalle mappe in Fig. 6.5 si nota che nelle zone in cui il target è presente in modo significativo il modello FULL2D riesce a determinare la distribuzione del VMR con errori che stanno sempre al di sotto del 10%. Un caso particolare è rappresentato dalla molecola d'acqua; infatti in questo caso si ottengono valori delle differenze percentuali elevati dove l' H_2O presenta valori massimi del VMR, in contrasto con quanto visto per le altre molecole. Questo è dovuto al fatto che, come detto nel Cap. 6.1.2, i modelli di analisi commettono degli errori elevati al di sotto della tropopausa a causa della crescita esponenziale del VMR al calare della quota nella troposfera che rende l'atmosfera opaca in seguito all'allargamento per pressione delle sue numerose forme spettrali.

I valori delle differenze percentuali ottenuti utilizzando il quantificatore 6.2 per la molecola di ozono, grazie alla sua distribuzione nell'intervallo di quote considerato priva di forti gradienti o bassi valori del VMR, sono i più significativi e possono quindi essere utilizzati come indice della precisione del nuovo strumento per questa molecola. In questo caso per entrambe le risoluzioni spettrali il modello FULL2D applicato allo strumento MIPAS2k riesce determinare la sua distribuzione con un errore relativo inferiore al 6 %.

6.3 Risoluzione spaziale

La risoluzione spaziale dello strumento nei suoi due modi d'osservazione è stata studiata utilizzando un metodo perturbativo. Questo metodo consiste nel perturbare il valore del VMR associato ad un determinato spicchio della discretizzazione 2D dell'atmosfera di riferimento utilizzata per creare gli osservati simulati e studiare in che modo la perturbazione viene riprodotta dal modello FULL2D. Fare questo equivale a valutare l'averaging kernel in quel punto [25]. L'analisi è stata effettuata utilizzando la distribuzione spaziale del VMR della molecola di ozono perchè, come visto nel capitolo precedente, permette di ottenere risultati affetti da minor errore rispetto alle altre molecole considerate grazie alla sua particolare distribuzione spaziale nell'intervallo di quote considerato.

La perturbazione è stata effettuata, per entrambe le risoluzioni spettrali dello strumento, moltiplicando o dividendolo per 2 il valore del VMR di un determinato spicchio. La scelta di utilizzare il fattore 2 per creare la perturbazione è giustificata dal fatto che in tal modo si ottengono dei valori plausibili del VMR associati allo

CAPITOLO 6

spicchio perturbato per la molecola di ozono. Per quanto riguarda lo spicchio il cui VMR è stato diviso per 2, si è deciso di utilizzarne uno posizionato alla latitudine di circa 90° e ad una quota di 30.75 km, nel mezzo di una regione che presenta un massimo del valore di VMR. Lo spicchio il cui VMR è stato moltiplicato per 2 è posto ad una una latitudine di circa 180° e ad una quota di 30.75 km, in cui vi è una zona di minimo del VMR. La scelta di perturbare spicchi posizionati in zone caratterizzate da valori abbastanza costanti del VMR è stata motivata dal fatto che se, al contrario, si perturbavano spicchi in zone caratterizzate da dei gradienti il risultato finale avrebbe finito col confondersi con la variazione del VMR degli spicchi vicini dovuta al gradiente stesso.

Di seguito saranno presentati i passaggi attraverso cui è stato possibile determinare la risoluzione spaziale dello strumento nel caso in cui questo operi con risoluzione spettrale di $0.2 \ cm^{-1}$, un procedimento analogo è stato effettuato per la risoluzione di $0.1 \ cm^{-1}$. Nella figura seguente (Fig. 6.6) sono mostrati gli ingrandimenti delle mappe del riferimento e del ricavato ottenute attraverso il metodo perturbativo appena descritto. Nella parte superiore sono mostrate le mappe ottenute perturbando il singolo spicchio dividendo il suo VMR per 2, mentre in quella inferiore le mappe ottenute perturbando il singolo spicchio moltiplicando il suo VMR per 2. In entrambi i casi a sinistra è mostrata la mappa del riferimento, in cui si nota distintamente lo spicchio perturbato, mentre a destra è mostrata la mappa del ricavato dove si può apprezzare come il modello FULL2D riesce a ricostruire la perturbazione iniziale.

Per ottenere un confronto più accurato tra i risultati ottenuti sono stati creati i profili verticali ed orizzontali, mostrati in Fig. 6.7, del VMR per OC e per la quota associati allo spicchio perturbato. In azzurro sono riportati i profili del VMR relativi all'atmosfera di riferimento in cui si può notare la perturbazione, in rosso i profili relativi all'atmosfera ricavata partendo dall'atmosfera di riferimento perturbata ed infine il profilo giallo è stato ottenuto utilizzando l'atmosfera ricavata senza perturbazione. Dalle figure, considerando che un grado di latitudine corrisponde a circa 111 Km, si apprezza come il gradiente verticale sia più pronunciato rispetto a quello orizzontale.



Figura 6.6: Mappe del riferimento (sinistra) e del ricavato (destra), ingrandite nella zona in cui è presente la perturbazione dello spicchio. Nella parte superiore sono riportate le mappe ottenute dividendo per 2 il VMR dello spicchio nella mappa del riferimento mentre sotto quelle ottenute moltiplicandolo per 2.



Figura 6.7: Profili orizzontali (sinistra) e verticali (destra) del VMR alla latitudine e alla quota associati allo spicchio perturbato dei riferimenti (azzurro), ricavati (rosso) e del ricavato senza perturbazione iniziale (giallo). Nella parte superiore sono riportati i profili relativi alla perturbazione ottenuta dividendo per 2 il valore del VMR dello spicchio mentre nella parte inferiore sono riportati i profili relativi alla perturbazione ottenuta moltiplicando per 2 il valore del VMR.

Per calcolare i valori della risoluzione spaziale dello strumento sono stati creati per prima cosa i profili in Fig. 6.8, ottenuti dalla differenza del VMR tra i profili in Fig 6.7 dell'atmosfera di riferimento (azzurro) e quelli dell'atmosfera ricavata (rosso), che mostrano in che modo il modello FULL2D riesce a modellare la perturbazione. Come si vede dalla Fig. 6.8 le differenze tra i VMR dell'atmosfera ricavata e quella di riferimento tendono a zero allontanandosi dallo spicchio perturbato, mentre in vicinanza di questo presentano un picco. L'area sottesa dal profilo delle differenze è proporzionale alla risoluzione spaziale dello strumento, infatti se lo strumento avesse una risoluzione spaziale infinitesima i profili dei valori ricavati e del riferimento in Fig. 6.7 sarebbero uguali e il profilo delle loro differenze in Fig. 6.8 avrebbe valore costante uguale a zero.



Figura 6.8: Differenze tra i VMR dell'atmosfera ricavata e quella di riferimento dei profili in Fig. 6.7. Nella colonna di destra rispetto alla Fig. 6.7 precedente ho invertito gli assi per comodità della rappresentazione.

Si è deciso di quantificare la risoluzione spaziale verticale o orizzontale dello strumento MIPAS2k utilizzando il criterio della larghezza a metà altezza (FWHM) [6] del triangolo avente l'area sottesa dal profilo delle differenze e altezza pari al massimo valore della differenza presente in ogni profilo. L'area sottesa dal profilo delle differenze è stata determinata utilizzando un integrazione numerica nell'intervallo di latitudini o altezze centrato nello spicchio perturbato, ossia in un intervallo di 5° di latitudine e 5 Km di quote in modo da eliminare gli offset visibili in Fig. 6.7. La risoluzione spaziale dello strumento può quindi essere scritta come:

$$FWHM = \frac{\sum_{i=1}^{n} [(|ret_i - ref_i|) \cdot \delta x]}{|ret_i - ref_i|_{max}}$$
(6.3)

dove il termine della sommatoria è l'area calcolata discretamente del triangolo ottenuta sommando su tutti gli spicchi considerati (n) il prodotto tra il valore nel profilo rappresentato in Fig. 6.8 e la dimensione verticale o orizzontale dello spicchio rappresentata in Km, indicata con δx . Il termine al denominatore rappresenta l'altezza del triangolo ossia il valore massimo della differenza presente in ogni profilo. I valori così ottenuti per le due risoluzioni spaziali e spettrali sono riportati in tabella 6.2.

Perturbazione	risoluzione spettrale (cm^{-1})	risoluzione orizzontale (Km)	risoluzione verticale (<i>Km</i>)
$VMP \times 0.5$	0.2	170.16	1.80
$V M h \times 0.5$	0.1	191.41	1.51
$VMD \times 2$	0.2	142.62	1.36
$V M h \times 2$	0.1	142.13	1.14

Tabella 6.2: Risoluzioni spaziali orizzontali e verticali ottenute dall'Eq. 6.3 in funzione della risoluzione spettrale dello strumento e del tipo di perturbazione effettuata.

Dalla tabella 6.2 si nota che i valori della risoluzione spaziale orizzontale e verticale ottenuti con una data perturbazione per le due risoluzioni spettrali sono simili. Confrontando i valori della risoluzione spaziale ottenuti per le due perturbazioni si nota che si ottengono dei valori leggermente migliori quando si utilizza la perturbazione in cui il VMR dello spicchio viene moltiplicato per 2. Questo è comprensibile alla luce del fatto che a valori maggiori del VMR corrisponde una maggiore sensibilità della misura.

I risultati in tabella 6.2 mostrano che per entrambe le perturbazioni e risoluzioni spettrali la risoluzione spaziale orizzontale ricavata ha una dimensione confrontabile con quella dello spicchio (circa 111 Km), mentre quella verticale è confrontabile al FOV dello strumento (2.2 Km).

Capitolo 7

Confronto tra MIPAS e MIPAS2k

L'ultimo passaggio dello studio dello strumento MIPAS2k è stato quello di confrontare le sue prestazioni con quelle di MIPAS. Questo è stato possibile analizzando il modo in cui i due strumenti sono in grado di ricostruire una particolare struttura atmosferica presente nella distribuzione del VMR dell'ozono presente dall'atmosfera di riferimento ECMWF.

Per poter fare questo confronto è stato necessario creare gli osservati simulati anche per lo strumento MIPAS utilizzando il modello diretto del trasferimento radiativo a partire dall'atmosfera di riferimento ECMWF (in modo analogo a quanto fatto per creare gli osservati simulati di MIPAS2k, vedi Cap. 5). Gli osservati simulati così ottenuti vengono utilizzati dal modello di inversione dei dati Geo-Fit per ricavare i valori nei profili verticali nella griglia di retrieval di MIPAS (un profilo ogni 3.6° circa). Nell'atmosfera di riferimento è stata identificata una struttura significativa con cui poter effettuare un confronto. La mappa del VMR dell'ozono definita dall'atmosfera ECMWF è quella di Fig. 6.1 riportata di nuovo nel pannello di sinistra in Fig. 7.1, mentre nel pannello di destra è riportato l'ingrandimento nella zona compresa tra i 315 - 358 gradi di OC e i 25 - 42 Km di quota, in cui è presente la struttura atmosferica identificata per il confronto. Nella mappa (Fig 7.1), i valori del VMR nei profili ECMWF sono stati interpolati per ottenere una copertura atmosferica continua.

Di seguito sono riportate le mappe ingrandite dei ricavati (Fig. 7.2) ottenute utilizzando il Geo-Fit e il FULL2D a partire dagli osservati simulati creati per i due strumenti, confrontate con l'ingrandimento dell'atmosfera di riferimento. In entrambi i casi i valori ricavati nei profili e negli spicchi sono stati interpolati per avere un



Figura 7.1: Mappa del VMR della molecola di ozono dell'atmosfera ECMWF (sinistra) e il suo ingrandimento (destra) nella zona in cui è presente la struttura atmosferica utilizzata per il confronto tra MIPAS e MIPAS2k.

confronto migliore con la mappa dell'atmosfera di riferimento, inoltre la scala di colori del VMR è stata scelta opportunamente in modo da far risaltare al meglio la struttura atmosferica considerata.

Come si vede dalla Fig 7.2 i due strumenti ricostruiscono la struttura atmosferica in modo diverso ed è evidente che MIPAS2k riesce a riprodurre meglio la forma della struttura. Questo è dovuto alle diverse risoluzioni spaziali. In altre parole i valori ricavati nei punti dei profili verticali nella mappa del Geo-Fit relativi a MIPAS sono troppo distanti tra di loro e l'interpolazione non riesce a ricostruire fedelmente la distribuzione spaziale del VMR. Nella mappa del FULL2D invece la discretizzazione bidimensionale è sufficientemente fitta e priva di zone in cui non vengono ricavati dei risultati, per questo motivo la mappa del FULL2D rappresenta un risultato miglio-re rispetto a quello ottenuto da MIPAS e che si avvicina di più a quello di riferimento.

Per una maggiore comprensione di quanto detto sopra, in Fig. 7.3 vengono riportate le mappe mostrate in precedenza senza l'interpolazione tra i valori ricavati dai modelli. Nel pannello di sinistra è mostrata la mappa del Geo-Fit in cui sono rappresentati solo i valori nei punti dei profili ricavati, mentre a destra è mostrata la mappa del FULL2D con i valori effettivamente ricavati negli spicchi della discretizzazione 2D. I valori ricavati dal Geo-Fit nei punti dei profili verticali riproducono bene quelli dell'atmosfera di riferimento, tuttavia come detto in precedenza, tra i punti ci sono ampie zone prive di informazione. Nella mappa del FULL2D invece



Figura 7.2: Confronto tra gli ingrandimenti delle mappe dell'atmosfera ECMWF (pannelli di sinistra) e quelle dei ricavati da MIPAS (sopra) e del MIPAS2k (sotto) (pannelli di destra).

i valori ricavati sono associati agli spicchi della discretizzazione dell'atmosfera che coprono l'intera mappa senza lasciare zone prive di informazione.



Figura 7.3: Mappa del Geo-Fit e del FULL2D dei ricavati senza interpolazione.
Capitolo 8

Conclusioni

In questo elaborato è stato presentato un possibile successore di MIPAS chiamato MIPAS2k in grado di proseguire il lavoro da lui cominciato. MIPAS2k è uno spettrometro a trasformata di Fourier che misura gli spettri di emissione dei gas atmosferici attraverso la tecnica delle misure al lembo. La caratteristica peculiare di MIPAS2k è quella di utilizzare un array detector 1D formato da un vettore di pixel con il quale è in grado di effettuare una scansione al lembo per ogni corsa dello specchio mobile dell'interferometro riuscendo così ad eseguire un numero nettamente maggiore di scansioni al lembo per orbita rispetto a MIPAS che utilizzava un singolo pixel detector effettuando quindi una singola geometria di osservazione per corsa. Per definire le caratteristiche strumentali di MIPAS2k ci siamo ispirati allo strumento IRLS di PREMIER, proposto come successore di MIPAS, ma non selezionato dall'ESA per una missione a breve termine. Per MIPAS2k è stato definito un modo d'osservazione "nominale" caratterizzato dalla stessa risoluzione spettrale dello strumento IRLS, nel suo modo detto "chemistry mode", di $0.2 \ cm^{-1}$. Per questo modo d'osservazione sono state utilizzate le stesse MWs di IRLS per ricavare la distribuzione spaziale dell' O_3 .

L'obbiettivo di questa tesi è stato quello di valutare le performance del nuovo strumento, determinandone alcune caratteristiche fondamentali quali precisione dei prodotti, la loro copertura e risoluzione spaziale. Per fare questo abbiamo considerato la distribuzione spaziale del VMR di alcune delle molecole target di MIPAS quali: $O_3, H_2O, HNO_3 \in N_2O$.

Come detto, per MIPAS2k sono state utilizzate le stesse MWs di IRLS per ri-

cavare la distribuzione dell' O_3 . Per le altre molecole le MWs non erano disponibili e per questo motivo ne è stato creato un set utilizzando lo stesso algoritmo con cui erano state create le MWs di IRLS per l' O_3 . All'interno di questo set la scelta delle MWs da impiegare per ogni specie chimica è stata effettuata utilizzando una quantità scalare detta Information Load, che descrive l'informazione portata all'interno di ogni spicchio sulla quantità da determinare. In questo modo è stato possibile scegliere le MWs che portavano la maggior informazione, coprendo al meglio l'intervallo di quote di interesse (6 - 54 Km).

Ricordando che lo strumento MIPAS poteva operare anche nel modo speciale 'S6" dedicato allo studio della regione atmosferica UTLS con risoluzione 0.1 cm^{-1} , di cui sono disponibili MWs create appositamente, abbiamo deciso di sfruttare questa disponibilità creando un secondo modo d'osservazione di MIPAS2k, oltre a quello "nominale", detto modo d'osservazione "S6", con risoluzione spettrale di $0.1 \ cm^{-1}$. Il secondo obbiettivo della tesi è stato quindi quello di studiare come variano le caratteristiche dei prodotti di MIPAS2k al variare del campionamento orizzontale delle misure, ossia della sua risoluzione spettrale. Nel modo d'osservazione "S6" lo strumento MIPAS2k effettua un campionamento orizzontale dell'atmosfera con frequenza inferiore rispetto al modo "nominale", eseguendo la metà delle scansioni al lembo per orbita in quanto il tempo per effettuare una scansione raddoppia poichè raddoppia il massimo cammino ottico dell'interferogramma. Per scegliere quali delle MWs utilizzare nel modo "S6" per ogni molecola, abbiamo adottato lo stesso procedimento impiegato per le MWs relative al modo "nominale" utilizzando l'Information Load. In questo caso però, per rendere paragonabili i risultati ottenuti con le due risoluzioni dello strumento si è deciso di utilizzare un numero di punti spettrali per sequenza analogo.

Lo strumento MIPAS2k, grazie all'uso dell'array detector, è in grado di eseguire un numero elevato di scansioni al lembo per orbita che determinano alti valori dell'Information Load all'interno degli spicchi. Per sfruttare questa capacità è stato messo a punto il modello di inversione dei dati FULL2D il quale, pur utilizzando come base di partenza il modello di inversione di MIPAS che ricava i valori dei parametri finali come profili verticali, si differenzia da questo in quanto determina i parametri all'interno degli spicchi della discretizzazione 2D dell'atmosfera. Per lo studio di MIPAS2k è stato necessario determinarne le caratteristiche senza avere a disposizione misure effettuate dallo strumento. Per questo motivo sono stati creati osservati simulati ricorrendo al modello diretto del trasferimento radiativo e utilizzando un'atmosfera di riferimento ad alta risoluzione. Utilizzando il modello FULL2D per analizzare gli osservati simulati, è stato possibile caratterizzare le distribuzioni spaziali dei parametri di interesse.

I risultati ricavati attraverso questo procedimento sono stati analizzati per determinare le caratteristiche dei prodotti del nuovo strumento attraverso opportune mappe e quantificatori, definiti per lo scopo, calcolati negli intervalli di quota di interesse per le molecole considerate.

L'analisi dei risultati ha mostrato che il modello FULL2D applicato a MIPAS2k riesce a riprodurre la distribuzione spaziale del VMR dell'atmosfera di riferimento con una copertura spaziale globale nell'intervallo di quote considerate. Le mappe delle differenze percentuali del VMR nei singoli spicchi di ogni molecola, hanno messo in evidenza che nelle zone in cui il target è presente in modo significativo il modello FULL2D riesce a determinare la distribuzione del VMR con errori che stanno sempre al di sotto del 10%. I valori del quantificatore delle differenze medie percentuali ottenuti per la molecola di ozono, grazie alla sua distribuzione nell'intervallo di quote considerato priva di forti gradienti o bassi valori del VMR, sono i più significativi e possono quindi essere utilizzati come indice della precisione del nuovo strumento per questa molecola. In questo caso per entrambe le risoluzioni spettrali il modello FULL2D applicato allo strumento MIPAS2k riesce determinare la sua distribuzione con un errore relativo inferiore al 6 %. I quantificatori hanno messo in evidenza anche come l'utilizzo di un campionamento più fitto dell'atmosfera (con una risoluzione spettrale inferiore) permette di ottenere dei risultati con precisione leggermente migliore rispetto a quelli ricavati utilizzando la metà della campionatura (con risoluzione spettrale doppia). Una prima spiegazione di questo risultato risiede nel fatto che nel modo d'osservazione "nominale", a parità di punti spettrali, sono state utilizzate in generale più MWs rispetto al modo "S6" e poichè ogni MW è caratterizzata da un intervallo spettrale che fornisce informazione ottimale in uno specifico intervallo di quote, quando lo strumento opera nel modo "nominale" riesce ad ottenere dei risultati con una copertura verticale migliore rispetto a quando opera nel modo "S6". Inoltre occorre considerare che il rumore spettrale delle misure nel modo "S6" è maggiore di un fattore $\sqrt{2}$ rispetto a quello del modo "nominale" in conseguenza della risoluzione spettroscopica dimezzata.

Nel valutare i risultati del confronto tra i due modi d'osservazione bisogna tenere conto della scelta di utilizzare un set di MWs che fornisca un numero di punti confrontabili per sequenza per le due risoluzioni spettrali che comporta un numero totale di punti per orbita che differisce di un fattore circa 2 fra le due risoluzioni spettrali. Una scelta di ugual numero di punti spettrali per orbita avrebbe favorito il modo "S6".

La risoluzione spaziale dello strumento è stata determinata utilizzando un metodo perturbativo, in cui il VMR di un singolo spicchio dell'atmosfera di riferimento è stato moltiplicato o diviso per 2, valutando poi in che modo il modello FULL2D riesce a riprodurre la perturbazione. I valori ottenuti mostrano che le risoluzioni spaziali sono simili per i due modi d'osservazione considerati e che per entrambi i tipi di perturbazione utilizzati la risoluzione spaziale orizzontale ricavata ha una dimensione confrontabile con quella dello spicchio (circa 111 Km), mentre quella verticale è confrontabile con il FOV dello strumento (2.2 Km).

Lo studio dello strumento MIPAS2k è stato completato confrontando le sue prestazioni con quelle del suo predecessore MIPAS. Questo è stato possibile analizzando il modo in cui i due strumenti sono in grado di ricostruire una particolare struttura atmosferica presente nella distribuzione del VMR nell'ozono dell'atmosfera di riferimento. I risultati ottenuti mostrano che MIPAS2k è in grado di modellare con una precisione nettamente migliore la struttura atmosferica considerata rispetto al suo predecessore. Questo risultato è una conseguenza della migliore risoluzione spaziale rispetto a MIPAS che era caratterizzato da una risoluzione orizzontale di circa 400 Km e verticale di circa 3 Km.

Elenco delle figure

2.1	Geometrie di osservazione di MIPAS	15
2.2	Esempio della copertura geografica giornaliera di MIPAS $\ .\ .\ .$.	16
4.1	Linee di vista di una sequenza di scansioni al lembo	32
4.2	Discretizzazione bidimensionale dell'atmosfera e ray tracing	34
4.3	Spettri di emissione alle medie latitudini ricavati utilizzando i due	
	modelli diretti del Geo-Fit e FULL2D	37
4.4	Differenze della radianza al variare della spaziature verticale dei livelli	37
4.5	Molteplicità spicchio	39
4.6	Mappe dell'Information Load	42
4.7	Mappa dell'Information Load delle MWs 0161 e 0162	43
6.1	Mappe O_3	52
6.2	Mappe H_2O	54
6.3	Mappe HNO_3	56
6.4	Mappe N_2O	58
6.5	Mappe differenze percentuali	60
6.6	Mappe con perturbazione	64
6.7	Profili con perturbazione	65
6.8	Profili delle differenze con perturbazione	66
7.1	Mappa atmosfera riferimento con la struttura atmosferica	70
7.2	Mappe dei ricavati con la struttura atmosferica $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	71
7.3	Mappe dei ricavati senza interpolazione con la struttura atmosferica .	72

Elenco delle tabelle

2.1	Bande spettrali e valori del NESR	17
2.2	Caratteristiche dei modi d'osservazione di MIPAS prima del gennaio	
	2005	18
2.3	Confronto tra le caratteristiche di MIPAS ("nominale") e MIPAS2k	21
4.1	Caratteristiche MWs dell'ozono	42
4.2	Caratteristiche MWs	44
6.1	Quantificatori	60
6.2	Risoluzione spaziale	67

Bibliografia

- "ESA: Candidate Earth Explorer Core Missions-Report for Assessment: PREMIER-PRocessor Exploration through Measurements of Infrared and millimetre-wave Emitted Radiation". SP-1313/5, ESA Publications Division, ESTEC, Keplerlaan 1, 2200 AG Nordwijk, The Netherlands, (2008).
- H.Fischer et al. "MIPAS: an instrument for atmospheric and climate research". Atmos. Chem. Phys., 8, 2151-2188 (2008).
- [3] E. Papandrea. "PhD Thesis Tomographic Inversion of MIPAS Measurements; Optimization of Retrieval Grids and Generation of Innovative Products". Universita di Bologna (2007).
- [4] M. Endemann. "MIPAS instrument concept and performance". ESA Earth Science Division ed. (European Space Agency, ESTEC) 1, 29 (1999).
- [5] ESA. "European Space Agency (ESA), Envisat-1: Mission and system summary". Eur. Space Agency Sci. Tech. Rep., ESA/SP-1229, 85 pp (2000).
- [6] M. Carlotti, B. M. Dinelli, E. Papandrea e M. Ridolfi. "Assessment of the horizontal resolution of retrieval products derived from MIPAS observations". Optics Express, Vol. 15, Issue 16, pp. 10458-10472 (2007).

- [7] Piera Raspollini e Simone Ceccherini. "Configuration Management of MIPAS L2 Auxiliary Data Files". Technical Note, Issue 6 ,Revision 2 (2011).
- [8] M.Ridolfi et al. "Optimized forward model and retrevial scheme for MIPAS nearreal-time data processing". Applied Optics, Vol. 39, Issue 8, pp. 1323-1340 (2000).
- [9] S. A. Clough, F. X. Kneizys, and R. W. Davis. "Line shape and the water vapour continuum". Atmos. Res. 23, 229-241 (1989).
- [10] R. H. Norton and R.Beer. "New apodizing functions for Fourier spectrometry". J. Opt. Soc. Am. 67, 419 (1977).
- [11] D. S. Silvia. "Data Analysis: A Bayesian Tutorial". Clarendon, Oxford, UK, (1996).
- [12] P. E. Gill, W. Murray e M. H. Wright. "Pratical Optimization." Academic, San Diego, Calif., (1981).
- [13] K. Levenberg. "A method for the solution of certain non-linear problems in least squares". Quart. Appl. Math. 2, 164 (1944).
- [14] P. R. Bevington and D. K. Robinson. "Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences". 3rd ed. McGraw-Hill (2003).
- [15] Massimo Carlotti, Bianca Maria Dinelli, Piera Raspollini, e Marco Ridolfi. "Geo-fit approach to the analysis of limb-scanning satellite measurements". Applied Optics, Vol. 40, Issue 12, pp. 1872-1885 (2001).

- [16] M. Carlotti, G. Brizzi, E. Papandrea, M. Prevedelli, M. Ridolfi, B. Dinelli, e L. Magnani. "GMTR: Two-dimensional geo-fit multitarget retrieval model for Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding/Environmental Satellite observations". Applied Optics, Vol. 45, Issue 4, pp. 716-727 (2006).
- [17] A. Dudhia, V. L. Jay, and C. D. Rodgers. "Microwindow Selection for High-Spectral-Resolution Sounders". Appl. Opt. 41, 3665-3673 (2002).
- [18] P. Morris. "Generation of compressed cross-section look-up tables for NRT MIPAS retrievals". J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 59, 481-493 (1998).
- [19] J. T. Houghton. "The Physics of Atmospheres". 2nd ed., CUP, Cambridge (1986).
- [20] M. Carlotti e L. Magnani. "Two-dimensional sensitivity analysis of MIPAS observations". Optics Express, Vol. 17, Issue 7, pp. 5340-5357 (2009).
- [21] M. Carlotti and B. Carli. "Approach to the Design and Data-Analysis of a Limb-Scanning Experiment". Appl. Opt. 33, 3237-3249 (1994).
- [22] J. J. Remedios, R. J. Leigh, A. M. Waterfall, D. P. Moore, H. Sembhi, I. Parkes, J. Greenhough, M.P. Chipperfield, e D. Hauglustaine. "MIPAS reference atmospheres and comparisons to V4.61/V4.62 MIPAS level 2 geophysical data sets". Atmos. Chem. Phys. Discuss., 7(4):9973-10017 (2007).
- [23] "http://badc.nerc.ac.uk/data/ecmwf-op/".

- [24] P. Jöckel et al. "The atmospheric chemistry general circulation model ECHAM5/MESSy1: consistent simulation of ozone from the surface to the mesosphere". Atmos. Chem. Phys., 6, 5067-5104. (2006).
- [25] Marco Ridolfi, Simone Ceccherini, Piera Raspollini e Sander Niemeijer. "Use of MIPAS vertical averaging kernels in validation activities". Technical Note, Issue 1.0 (2010).