



HAL
open science

**Inversion de spectres infrarouges en émission thermique
de la basse atmosphère terrestre enregistrés sous ballon
par transformée de Fourier en visée au nadir :
préparation de la mission spatiale IASI**

Victor Manuel Ferreira

► **To cite this version:**

Victor Manuel Ferreira. Inversion de spectres infrarouges en émission thermique de la basse atmosphère terrestre enregistrés sous ballon par transformée de Fourier en visée au nadir : préparation de la mission spatiale IASI. Physique [physics]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2005. Français. NNT : . tel-00009090

HAL Id: tel-00009090

<https://theses.hal.science/tel-00009090v1>

Submitted on 25 Apr 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITE DE PIERRE ET MARIE CURIE PARIS VI

THÈSE DE DOCTORAT

Spécialité : physique moléculaire et applications

Présentée par

Victor FERREIRA

Inversion de spectres infrarouges en émission thermique de la basse atmosphère terrestre enregistrés sous ballon par transformée de Fourier en visée au nadir : préparation de la mission spatiale IASI.

Soutenue le 7 février 2005 devant le jury composé de :

Mr	P. Indelicato	Président du jury
Mme	M. De Mazière	Rapporteur
Mr	T. Phulpin	Rapporteur
Mme	N. Lacombe	Examinatrice
Mr	M. Pirre	Examineur
Mr	C. Camy-Peyret	Directeur de thèse

UNIVERSITE DE PIERRE ET MARIE CURIE PARIS VI

THÈSE DE DOCTORAT

Spécialité : physique moléculaire et applications

Présentée par

Victor FERREIRA

Inversion de spectres infrarouges en émission thermique de la basse atmosphère terrestre enregistrés sous ballon par transformée de Fourier en visée au nadir : préparation de la mission spatiale IASI.

Soutenue le 7 février 2005 devant le jury composé de :

Mr	P. Indelicato	Président du jury
Mme	M. De Mazière	Rapporteur
Mr	T. Phulpin	Rapporteur
Mme	N. Lacombe	Examinatrice
Mr	M. Pirre	Examineur
Mr	C. Camy-Peyret	Directeur de thèse



CENTRE NATIONAL D'ÉTUDES SPATIALES



Laboratoire de Physique Moléculaire et Applications



REMERCIEMENTS

Je souhaite remercier le Laboratoire de Physique Moléculaire et Applications pour m'avoir accueilli pendant ces trois années, ce qui m'a donné la possibilité d'effectuer ce travail de thèse, aboutissement d'un long parcours universitaire et projet qui me tenait particulièrement à cœur.

Je remercie doublement Mr. Claude Camy-Peyret qui m'a accueilli en tant que directeur du LPMA, et qui, en tant que directeur de thèse, m'a fait partager sa passion pour la physique moléculaire atmosphérique, domaine où pour ma part j'effectuais mes premiers pas.

Je remercie Martine De Mazière l'Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique et Thierry Phulpin du Centre National d'Etudes Spatiales d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail

Je remercie le Centre National d'Etudes Spatiales qui a cofinancé ma bourse de thèse avec la société Noveltis, qui a suivi mon travail avec intérêt.

Un grand merci à Sébastien Payan, qui au cours de ces trois ans a montré pour moi une grande disponibilité et beaucoup de patience. Nos conversations de tous les jours ont enrichi ces trois années de points de vue et de conseils.

Je remercie aussi le professeur Nelly Lacome et le professeur Victor Dana, sans qui cette thèse n'aurait sans doute pas été entreprise.

Enfin, je voudrais remercier mes parents qui m'ont toujours aidé et accompagné dans mes études. Ce travail est aussi le résultat de leur soutien de leur confiance.

Lorsque le Petit Albert Einstein demandait à son papa de faire avec lui une partie de billes, ce dernier lui répondait inmanquablement : « J'ai pas le temps. » Lorsque le petit Albert Einstein se plaignait d'avoir trop de devoirs, son papa lui répondait inmanquablement : « Quand on veut, on trouve toujours le temps. »

Gotlib M.

SOMMAIRE

<u>Sommaire</u>	ii
<u>Index des figures</u>	vi
<u>Index des tableaux</u>	x
<u>Liste des sigles et acronymes</u>	xii
<u>Introduction générale</u>	1
<u>Chapitre I : Physico-chimie et Sondage atmosphérique</u>	7
<u>I.1 Structure de l'atmosphère terrestre.</u>	8
I.1.1 Découpage vertical de l'atmosphère.	8
I.1.2 Nature et dynamique de la basse atmosphère.	9
I.1.3 Transport et échanges entre la troposphère et la basse stratosphère.	11

I.1.4 Les paramètres caractéristiques de l'atmosphère.....	12
<u>I.2 Climatologie : l'atmosphère d'hier et aujourd'hui</u>	14
I.2.1 L'évolution des espèces chimiques dans l'atmosphère.....	14
I.2.2 L'évolution de la température.....	16
I.2.3 La chimie atmosphérique actuelle.....	21
<u>I.3 Les méthodes de sondage atmosphérique à distance</u>	25
I.3.1 Les méthodes de mesures des constituants atmosphériques.....	25
I.3.2 Les mesures optiques <i>in situ</i>	26
I.3.3 Les mesures à distance.....	28
I.3.4 Perspectives des instruments et des mesures.....	31
<u>I.4 L'expérience IASI-ballon et l'instrument IASI</u>	32
I.4.1 La configuration instrumentale de IASI-ballon.....	32
I.4.2 Configuration d'un vol IASI-ballon.....	34
I.4.3 L'expérience IASI embarquée sur la plate-forme satellitaire MetOp.....	36
<u>I.5 Conclusion</u>	40
<hr/>	
<u>Chapitre II : Transfert radiatif et inversion de spectres au nadir en émission thermique</u>	43
<u>II.1 Interactions rayonnement - matière</u>	44
II.1.1 Spectroscopie moléculaire atmosphérique.....	44
II.1.2 Spectroscopie de vibration-rotation.....	45
<u>II.2 Modèle du transfert radiatif</u>	47
II.2.1 Équation du transfert radiatif.....	47
II.2.2 Intensité et profil d'une raie.....	52
II.2.3 Sections efficaces et « look-up tables ».....	56
<u>II.3 Spectres simulés</u>	59
II.3.1 Les continua.....	59
II.3.2 Interférences entre raies ou « line-mixing ».....	61
II.3.3 Prise en compte des effets instrumentaux.....	62
<u>II.4 Inversion des spectres</u>	64
II.4.1 Le concept de l'inversion.....	64
II.4.2 Méthode d'ajustement des spectres par les moindres carrés.....	65
II.4.3 Méthode de Levenberg-Marquardt.....	71
II.4.4 L'information <i>a priori</i>	76
<u>II.5 Méthodologie de l'inversion d'un profil à partir d'un spectre IASI-ballon</u>	77
<hr/>	
<u>Chapitre III : Inversion de l'ozone</u>	83
<u>III.1 L'acquisition des spectres IASI02</u>	84

III.1.1 Profil du vol IASI02	84
III.1.2 Conditions météorologiques lors de l'enregistrement des spectres	86
III.2 Base de données spectroscopiques pour l'ajustement des spectres infrarouges en émission thermique	89
III.2.1 Fenêtre spectrale pour l'étude des profils d'ozone	89
III.2.2 Impact du choix de la base spectroscopique sur l'ajustement	91
III.3 Jacobien et noyaux moyens à l'usage de la détermination du profil d'ozone	96
III.3.1 Définitions et notations	96
III.3.2 Fonctions de poids et noyaux moyens des profils d'ozone	98
III.3.3 Sélection des niveaux de restitution des profils	102
III.3.4 L'inversion des profils d'ozone au cours vol IASI02	106
III.3.5 Validation de l'instrument SCIAMACHY	108
III.4 Entropie Informationnelle et nombre de degrés de liberté	110
III.4.1 Notion d'entropie informationnelle selon Shannon	111
III.4.2 Détermination de l'entropie informationnelle et des degrés de liberté dans la restitution de profils d'ozone	112
III.4.3 Nombre de degrés de liberté et information dans les profils d'ozone	117
III.5 Comparaison des inversions entre les spectres à la résolution IASI-ballon et les spectres « IASI-like »	122
III.5.1 Dégradation des spectres IASI-ballon à la résolution de IASI/MetOp ...	122
III.5.2 Ajustement des spectres à la résolution dégradée de IASI/MetOp	124
III.5.3 Comparaison entre « IASI-like » et IASI-ballon	126
III.6 Conclusion	129

Chapitre IV : Sondage de molécules d'intérêt atmosphériques dans différentes fenêtres spectrales 133

IV.1 Fenêtre 1140 - 1200 cm⁻¹	134
IV.1.1 Ajustement des spectres infrarouges IASI02	134
IV.1.2 L'information sur le protoxyde d'azote	136
IV.1.3 Comparaison des résultats obtenus avec les spectres dégradés à la résolution « IASI-like »	140
IV.1.4 Conclusion	142
IV.2 Fenêtre 1240 - 1320 cm⁻¹	142
IV.2.1 Espèces chimiques en présence et ajustement des spectres	142
IV.2.2 Colonne totale de CH₄ et de N₂O	145
IV.2.3 Comparaison des résultats avec les spectres dégradés « IASI-like »	148
IV.3 Fenêtre 2149 – 2170 cm⁻¹	150
IV.3.1 Espèces chimiques en présence et ajustement des spectres	150
IV.3.2 Comparaison des résultats avec les spectres dégradés « IASI-like »	154
IV.3.3 Conclusion	155

<u>IV.4. Exercice d'intercomparaison ce calcul raie par raie (LIE)</u>	156
<u>IV.4.1 Le LIE et ses objectifs</u>	156
<u>IV.4.2 Les spectres du LIE-2</u>	159
<u>IV.5 Conclusion</u>	165
<hr/>	
<u>Chapitre V : Modélisation d'une cellule à gaz pour la calibration de l'instrument IASI/MetOp</u>	169
<u>V.1 Simulations et sélection du mélange gazeux de la cellule</u>	170
<u>V.1.1 Objectifs et prérogatives de la cellule</u>	170
<u>V.1.2 Détermination des gaz dans la cellule</u>	172
<u>V.1.3 Tests sur NH₃ et CO</u>	175
<u>V.2 Modélisation de la transmission à travers la cuve</u>	180
<u>V.2.1 Prise en compte de la cellule</u>	180
<u>V.2.2 Prise en compte des lames en ZnSe dans les simulations</u>	182
<u>V.2.3 Modélisation dans le cas de lames absorbantes</u>	184
<u>V.3 Conclusion</u>	189
<hr/>	
<u>Conclusion</u>	193
<hr/>	
<u>Bibliographie</u>	199
<hr/>	
<u>Annexes</u>	
<u>A.1 Rappel de spectroscopie</u>	207
<u>A.2 Entropie informationnelle Spectrale et cumulée sur un intervalle</u>	213
<u>A.3 Entropie informationnelle pour l'ozone dans la fenêtre vers 950 – 1100cm⁻¹ à la résolution IASI/MetOp</u>	219
<u>A.4 Cellule à gaz réalisée au LPMA pour la calibration de l'instrument IASI/MetOp</u>	223

INDEX DES FIGURES

Chapitre I

I.1 : Découpage vertical de l'atmosphère terrestre en fonction du gradient de température.	9
I.2 : Représentation des mouvements d'air verticaux en fonction de la latitude.	11
I.3 : Circulation générale d'un point de vue tridimensionnel avec le mouvement des cellules et la composante horizontale.	11
I.4 : Temps de résidence des particules dans la troposphère et la stratosphère.	12
I.5 : Évolution de la composition de l'atmosphère de la Terre depuis sa formation jusqu'à l'époque actuelle. . .	15
I.6 : Bilan de l'absorption du rayonnement solaire et de l'émission de l'atmosphère.	17
I.7 : Forçage radiatif global du système climatique en l'an 2000 par rapport à 1750.	18
I.8 : Anomalies des températures moyennes mondiales à la surface.	19
I.9 : Champ de vue d'instruments de sondage satellitaire.	29
I.10 : Nacelle LPMA/IASI ballon (schéma)	33
I.11 : Nacelle LPMA/IASI ballon (photo)	33
I.12 : Chaîne de vol de l'instrument LPMA/IASI ballon.	35
I.13 : Configuration du vol IASI01 le 13 mars 2001.	36
I.14 : Instrument IASI : vue avec le système permettant la calibration de l'instrument.	37
I.15 : Instrument IASI : vue avec le système optique.	37
I.16 : Satellite MetOp et ses instruments.	38
I.17 : Champ de vue de IASI/MetOp.	38
I.18 : Bruit radiométrique attendu pour l'instrument IASI à 280 K, en radiance.	39
I.19 : Bruit radiométrique attendu pour l'instrument IASI à 280 K, en température de brillance.	39

Chapitre II

II.1 : Echelle des énergies du rayonnement électromagnétique correspondant aux différents domaines du spectre.	44
II.2 : Spectre atmosphérique en émission dans l'infrarouge thermique (en gris) réalisé par l'instrument IMG le 4 avril 1997 dans le pacifique sud.	46
II.3 : Géométrie le long du parcours optique pour l'équation du transfert radiatif pour un sondage en visée au nadir.	49
II.4 : Profils Doppler et Lorentz pour des raies d'absorption d'égales largeur à mi-hauteur.	55
II.5 : Schéma qualitatif de l'importance relative des différents profils de raies suivant l'altitude.	56
II.6 : Schéma d'interpolation logarithmique à deux dimensions.	58
II.7 : Exemple de comparaison d'un spectre mesuré par AERI avec des simulations de spectres sans la prise en compte du continuum.	60
II.8 : Coefficient théorique d'absorption en fonction de la fréquence dans la région $661-667\text{ cm}^{-1}$, (bande ν_2 de CO ₂)	61
II.9 : Processus d'inversion.	65
II.10 : Organigramme de l'algorithme d'inversion de la méthode des moindres carrés avec amortissement.	70
II.11 : Organigramme de l'algorithme d'inversion de Levenberg-Marquardt.	76
II.12 : Schéma résumant les processus entrant en jeux lors des traitements et inversions des spectres infrarouges.	78

Chapitre III

III.1 : Profil du vol IASI02 en fonction de l'altitude du ballon au cours du temps de vol.	84
III.2 : profil du vol IASI02 en fonction de l'altitude du relief survolé par le ballon.	84
III.3 : Carte topographique de la région de Kiruna.	85
III.4 : Profil vertical de la température à différentes heures le jour du vol de IASI02.	86
III.5 : Image obtenue au cours du vol IASI02 par la caméra infrarouge.	87
III.6 : Image obtenue au cours du vol IASI02 par la caméra infrarouge.	87
III.7 : Température de brillance des scènes atmosphériques.	88
III.8 : Contributions spectrales des différentes espèces présentes dans la fenêtre $950 - 1100\text{ cm}^{-1}$ pour un spectre atmosphérique en émission thermique en visée vers le bas	90
III.9 : Exemple d'ajustement de spectre IASI-ballon en utilisant les bases spectroscopiques MIPAS pour le calcul des sections efficaces de l'ozone	92
III.10 : Exemple d'ajustement de spectre IASI-ballon en utilisant les bases spectroscopiques HITRAN pour le calcul des sections efficaces de l'ozone.	92
III.11 : Différence du spectre observe IASI-ballon et du spectre calculé en radiance en utilisant pour les sections efficaces. MIPAS	93
III.12 : Différence du spectre observe IASI-ballon et du spectre calculé en radiance en utilisant pour les sections efficaces HITRAN 2000.	93
III.13 : Différence du spectre observe IASI-ballon et du spectre calculé en température de brillance en utilisant pour les sections efficaces MIPAS.	93
III.14 : Différence du spectre observe IASI-ballon et du spectre calculé en température de brillance en utilisant pour les sections efficaces HITRAN 2000.	93
III.15 : Différence entre spectres obtenus après ajustement en utilisant avec les bases spectroscopiques HITRAN et MIPAS.	95
III.16 : Sections efficaces obtenues à partir la base de données spectroscopique HITRAN et MIPAS.	96
III.17 : Différence relative en pourcentage des sections efficaces par rapport au calcul avec la base MIPAS.	96
III.18 : Visualisation des fonctions de poids en 2 dimensions obtenue pour chaque altitude du profil d'ozone (vol IASI02), lors de l'inversion de la micro fenêtre entre 950 et 1100 cm^{-1}	100
III.19 : Visualisation tridimensionnelle des fonctions de poids obtenue pour chaque altitude du profil d'ozone (vol IASI02), lors de l'inversion de la micro fenêtre entre 950 et 1100 cm^{-1}	100
III.20 : Noyaux moyens obtenus pour le profil d'ozone en utilisant les bases spectroscopiques MIPAS et HITRAN 2000.	101
III.21 : Exemples de profils restitués en utilisant différents niveaux de restitution lors de l'inversion et comparaison avec le sondage ozone effectué le jour du vol IASI01.	104
III.22 : Exemples de profils restitués en utilisant 2 niveaux de restitution lors de l'inversion et comparaison avec le sondage ozone effectué le jour du vol IASI01.	105
III.23 : Comparaison entre profils d'ozone inversés à partir des spectres IASI-ballon et le sondage d'ozone	

effectué le même jour	106
III.24 : Ensemble des profils d’ozone inversés à partir des spectres IASI02 avec deux altitudes de restitution à 6 et 19 km.	107
III.25 : Satellite ENVISAT et ses différents instruments.	109
III.26 : Colonne d’ozone mesurée par LPMA/IASI02 et par SCIAMACHY dans la bande 1 et 2.	109
III.27 : Comparaison des colonnes d’O ₃ mesurées par SCIAMACHY dans la bande 1 à la colonne moyenne mesurée par IASI-ballon.	110
III.28 : Apport d’information pour différentes espèces chimiques présentes dans la fenêtre comprise entre 2000 et 2200 cm ⁻¹	117
III.29 : Information apportée par chaque paramètre d’altitude du profil d’ozone sur chaque nombre d’onde de la micro-fenêtre 950-1100 cm ⁻¹	119
III.30 : Fonction de réponse de l’instrument IASI (ISRF) comparée à une gaussienne ayant une demi-largeur à mi-hauteur (FWHM) de 0,5 cm ⁻¹	122
III.31 : Exemple de spectre en émission thermique pour la région de la bande de l’ozone à 10µm.	123
III.32 : Bruit théorique de IASI/MetOp et bruits obtenus pour les spectres IASI02 et IASI-like dans des micro-fenêtres couvrant chaque détecteur de IASI.	123
III.33 : Noyaux moyens obtenus pour le profil d’ozone en utilisant la base spectroscopique MIPAS pour l’inversion de spectre à la résolution de IASI/MetOp.	125
III.34 : Exemple d’ajustement de spectre « IASI-like ».	126
III.35 : Ensemble des profils d’ozone inversés à partir des spectres IASI02 à la résolution « IASI-like ».	127
III.36 : Colonnes totales obtenues à partir des spectres IASI02 à la résolution spectrale IASI-ballon et IASI/MetOp.	128

Chapitre IV

IV.1 : Simulation des différentes contributions spectrales de O ₃ , N ₂ O, H ₂ O, CO ₂ , et CFC-12 dans la fenêtre 1145 – 1195 cm ⁻¹	134
IV.2 : Exemple d’ajustement de spectre IASI02 dans la fenêtre 1145 – 1195 cm ⁻¹ avec en dessous les résidus en radiance et en température de brillance.	135
IV.3 : Entropie informationnelle de N ₂ O dans la fenêtre 1145 – 1195 cm ⁻¹	137
IV.4 : Noyaux moyens pour N ₂ O obtenus dans la fenêtre 1145-1195 cm ⁻¹ pour les résolutions ; (a) IASI-Ballon et (b) IASI/MetOp.	137
IV.5 : Fonctions de poids de N ₂ O dans la fenêtre 1145 - 1200 cm ⁻¹ pour un spectre à la résolution de IASI/MetOp.	138
IV.6 : Fonctions de poids de N ₂ O dans la fenêtre 1145 - 1200 cm ⁻¹ pour un spectre à la résolution de IASI-ballon.	139
IV.7 : Exemple d’ajustement de spectre dégradé à la résolution IASI/MetOp dans la fenêtre 1140-1200 cm ⁻¹	140
IV.8 : Colonnes totales de N ₂ O obtenus à partir du vol IASI02.	141
IV.9 : Espèces prises en comptes dans les simulations de la région 1240 – 1320 cm ⁻¹	143
IV.10 : Exemple d’ajustement d’un spectre IASI02 dans la région 1240 – 1320 cm ⁻¹ , avec en dessous le résidu en radiance et en température de brillance.	144
IV.11 : Colonnes totales obtenues à partir des spectres IASI02 pour l’inversion de la région 1240 – 1320 cm ⁻¹ de (a) N ₂ O et (b) CH ₄	145
IV.12 : Corrélation entre les Colonnes CH ₄ /N ₂ O (pour la micro-fenêtre 1240-1320 cm ⁻¹).	146
IV.13 : Colonnes de méthane mesurées par LPMA/IASI et par SCIAMACHY dans la bande 7 (a) et la bande 8 (b) en fonction de la position de la mesure.	147
IV.14 : Colonnes de N ₂ O mesurées par LPMA/IASI et par SCIAMACHY dans la bande 7 en fonction de la position de la mesure.	147
IV.15 : Exemple d’ajustement de spectre « IASI-like » dans la région 1240 – 1320 cm ⁻¹ , avec en dessous le résidu en radiance et en température de brillance.	148
IV.16 : Comparaison entre les colonnes totales de méthane après inversion des spectres à la résolution IASI-ballon et à la résolution IASI/MetOp.	149
IV.17 : Comparaison entre les colonnes totales de N ₂ O après inversion des spectres à la résolution IASI-ballon et à la résolution IASI/MetOp.	149
IV.18 : Contribution spectrale des différentes espèces chimiques dans la fenêtre 2149 – 2170 cm ⁻¹	151
IV.19 : Exemple d’ajustement de spectre IASI02 dans la région 2149 - 2170 cm ⁻¹	151
IV.20 : Fonction de poids pour CO dans la région spectrale 2149 – 2170 cm ⁻¹	152
IV.21 : Noyaux moyens pour CO dans la région spectrale 2149 – 2170 cm ⁻¹	153

IV.22 : Exemple d'ajustement de spectre « IASI-like » dans la région 2149-2170 cm^{-1}	154
IV.23 : Comparaison entre les colonnes totales de CO obtenues à partir des spectres IASI02 et des spectres « IASI-like » dans la région spectrale 2149 – 2170 cm^{-1}	155
IV.24 : Exemple de spectre en température de brillance ARIES enregistré en avril 1999.	160
IV.25 : Instrument NAST embarqué sous avion de type Proteus.	161
IV.26 : Spectre NAST-I enregistré le 17 juillet 2001 près de la baie de Chesapeake (Etat de Virginie U.S.A.).	162
IV.27 : Spectre IASI-like généré à partir d'un spectre IASI-Ballon du vol IASI01.	163
IV.28 : Variation de l'émissivité en fonction du nombre d'onde d'après l'ajustement à partir du spectre IASI-like proposé pour le LIE-2.	165

Chapitre V

V.1 : Fonction d'appareil utilisée pour la convolution des spectres simulés de la cuve.	171
V.2 : Spectre d'émission calculé pour H_2O dans la bande 1 et le bruit de IASI correspondant.	173
V.3 : Spectre d'émission calculé de CO_2 dans la bande 3 à 300k et pour une pression totale de 15 hPa.	173
V.4 : Spectre d'émission calculé de CH_4 dans la bande 2.	174
V.5 : Sections efficaces de la base HITRAN 2000 pour CO et NH_3 dans la région 650-2300 cm^{-1}	175
V.6 : Spectre d'émission convolué dans la bande 1 de IASI (raies de NH_3) à basse pression et température élevée.	176
V.7 : Spectre d'émission convolué dans la bande 2 de IASI (raies de NH_3) à basse pression et température élevée.	177
V.8 : Spectre d'émission convolué dans la bande 3 de IASI (raies de CO) à basse pression et température élevée.	177
V.9 : Simulation pour la bande 1 de IASI du mélange gazeux de CO/ NH_3 pour 2 températures (298 K et 313 K) et pour une pression de 10 hPa.	180
V.10 : Simulation pour la bande 2 et 3 de IASI du mélange gazeux de CO/ NH_3 pour 2 températures (298 K et 313 K) et pour une pression de 10 hPa.	181
V.11 : Spectres en température de brillance obtenue avec la cellule à gaz IASI et enregistré à travers chacun des pixels (P1 à P4) de l'instrument.	189

INDEX DES TABLEAUX

Chapitre I

I.1 : Gaz à effet de serre et influence des activités humaines.	19
I.2 : Classification des différentes méthodes de mesure.	21
I.3 : Caractéristiques de LPMA/IASI ballon.	29
I.4 : Caractéristiques et bande spectrale de l'instrument IASI.	34
I.5 : Produits déduits des mesures de l'instrument IASI/MetOp.	35

Chapitre II

II.1 : Correspondances entre énergies absorbées par une molécule et phénomène moléculaire.	40
--	----

Chapitre III

III.1 : Espèces chimiques présentes dans la micro-fenêtre 950 – 1100 cm ⁻¹	82
III.2 : Caractéristiques et performances de l'instrument SCIAMACHY.	101
III.3 : Degrés de liberté et entropie informationnelle obtenus après la décomposition en valeurs singulières λ_i de la matrice \tilde{K}	108

Chapitre IV

IV.1 : Participants du LIE-1 et noms des algorithmes employés pour l'exercice.	156
IV.2 : Caractéristiques des bandes spectrales des instruments enregistrant les spectres utilisés lors du LIE-2.	157
IV.3 : Micro-fenêtres utilisées pour les simulations avec la répartition des espèces chimiques suivant leur présence.	164

Chapitre V

V.1 : Composantes du profil de raies de NH_3 dans la bande 2 de IASI avec la prise en compte de l'élargissement par l'air dans la composante lorentzienne.....	178
V.2 : Composantes du profil de raies de NH_3 dans la bande 2 de IASI sans la prise en compte de l'élargissement par l'air dans la composante lorentzienne.....	179

LISTE DES SIGLES ET ACRONYMES

4A : Automatized Atmospheric Absorption Atlas

AERI : Atmosphere Emitted Radiance Interferometer

AFGL: Air Force Geophysics Laboratory

AIRS :Atmospheric InfraRed Sounder

ARIES : Airborne Research Interferometer Evaluation System

BSO :Ballon Stratosphérique Ouvert

CALIPSO : Cloud Aerosol Lidar and Infrared Pathfinder Satellite Observations

CCD : Charge Coupled Device

CNC :Corps Noir Chaud

CNES : Centre National d'Etudes Spatiales

CNF : Corps Noir Froid

ECMWF : European Centre for Medium-range Weather Forecast

EUMETSAT :EUropean organisation for the Exploitation of METeorological SATellite

ESTEC : European Space research and TEchnology Centre

FTIR :Fourier Transform InfraRed

GEISA : Gestion et Etude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques

GPS : Global Positioning System

HITRAN : High-resolution TRANsmission molecular absorption database
IASI : Infrared Atmospheric Sounding Interferometer
IFOV : Instantaneous Field Of View
IMG : Interferometric Monitor of Greenhouse gases.
IPCC : Intergovernmental Panel on Climate Change
ISRF : Instrument Spectral Response Function
ISSWG : IASI Sounding Science Working Group
LARA : LPMA Atmospheric Retrieval Algorithm
LIE : Line-by-line Intercomparison Exercise
LPMA : Laboratoire de Physique Moléculaire et Applications
LTE : Local Thermodynamic Equilibrium
MetOp : Meteorological Operational satellite
MIPAS : Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding
NAST-I : NPOESS Airborne Sounder Testbed - Interferometer
NPOESS : National Polar-orbiting Operational Environmental Satellite System
OPD : optical path difference
SCIAMACHY : SCanning Imaging Aborption spectroMeter for Atmospheric CHartographY
SDLA : Spectroscopie par Diode Laser Accordables
TES : Tropospheric Emission Spectrometer
TOMS : Total Ozone Mapping Spectrometer instrument
TROC : TROspheric Chemistry and climate
UKMO : United Kingdon Meteorological Office
UT : Universal Time

INTRODUCTION GÉNÉRALE

L'étude de l'atmosphère terrestre a fait l'objet d'un regain d'intérêt depuis quelques décennies. L'environnement et le changement climatique sont aujourd'hui les principaux sujets qui justifient l'effort de recherche dans l'observation, la modélisation et la simulation de phénomènes atmosphériques. Ces recherches répondent à des préoccupations immédiates (météorologie, qualité de l'air) mais aussi à des questions plus globales (trou d'ozone, réchauffement climatique), phénomènes qui ont ou qui auront un impact sur nos futures conditions de vie. Ainsi en étudiant le transfert radiatif on peut déterminer la structure thermodynamique ou la composition chimique de l'atmosphère et suivre son évolution.

Les moyens d'investigations se sont notablement perfectionnés, et on dispose de nombreux instruments spécifiques qui permettent d'obtenir des informations sur l'atmosphère de manière très locale ou à une échelle globale.

Il est clair actuellement que seules les observations spatiales permettent une vision globale des phénomènes radiatifs, dynamiques et physico-chimiques qui se déroulent dans l'atmosphère terrestre. Les instruments spatiaux qui permettent d'obtenir des données

pertinentes sur la composition de la stratosphère sont maintenant bien développés (l'instrument ILAS sur ADEOS, MIPAS sur Envisat, ACE, ...) et/ou doivent être mis en orbite dans un futur proche. Mais le sondage des espèces troposphériques depuis l'espace est à un stade beaucoup moins avancé, malgré l'importance de la troposphère pour les problèmes d'environnement atmosphérique. Plusieurs projets de missions spatiales visant à mieux mesurer la composition troposphérique sont à l'étude dont, le projet IASI initié par des ingénieurs et scientifiques français.

Le travail présenté ici rentre dans le cadre de la « préparation de missions spatiales » dans le domaine de l'observation de la Terre par spectroscopie infrarouge. En bénéficiant de l'expérience du laboratoire LPMA dans le domaine du traitement et de l'analyse des données spatiales, nous nous sommes appuyés sur les données acquises par l'expérience IASI-ballon qui fournit des spectres en émission thermique par visée au nadir de la troposphère et de la basse stratosphère dans des conditions très voisines de ce qui est prévu pour l'expérience IASI embarquée sur la plate-forme satellitaire MetOp.

Les études préparatoires à une mission spatiale ont par nature un caractère interdisciplinaire. Le sujet couvre en effet des domaines comme la spectroscopie moléculaire, le transfert radiatif atmosphérique et les problèmes d'environnement global ainsi que les techniques qu'il est nécessaire de maîtriser et de faire progresser (spectroscopie de Fourier embarquée, modélisation et méthodes d'inversion, nuages et aérosols, émissivité des surfaces,...).

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés dans un premier temps à la modélisation du transfert radiatif dans le cas de spectres en émission thermique dans une géométrie en visée verticale vers le bas (nadir). Nous rappelons les différentes étapes et des différents aspects spectroscopiques pris en compte dans la simulation d'un spectre infrarouge. Nous présenterons les dernières évolutions du programme d'inversion LARA, notamment la prise en compte du rayonnement de l'atmosphère rétro-diffusé par la surface. D'autres aspects ont été examinés comme les phénomènes spectroscopiques de type « line-mixing » pour CO₂ ou le continuum de la vapeur d'eau, effets qui ne peuvent être reproduits que par des modèles semi-empiriques dont on doit tenir compte dans les régions spectrales utilisées pour l'inversion. Enfin l'utilisation de sections efficaces pré-calculées (lookup tables) a permis une optimisation des temps de calcul et une souplesse facilitant le traitement rapide et systématique des micro-fenêtres étudiées.

Le programme LARA du LPMA est un algorithme scientifique qui permet la détermination de valeurs physiques à partir de spectres atmosphériques par une méthode

inverse (ou méthode d'inversion). Nous avons détaillé les différentes étapes permettant de restituer les concentrations des composées chimiques à partir d'un spectre en nous inspirant du formalisme de C.D. Rodgers.

Les vols ballons qu'effectue le laboratoire LPMA dans le cadre de la préparation de la mission spatiale IASI permettent l'acquisition de spectres infrarouges en visé au nadir. Pour ce travail nous avons disposé de données expérimentales provenant de deux vols effectués à Kiruna (Suède). La plus grande partie de mon travail a porté sur le traitement et l'exploitation des spectres du second vol IASI02 qui a eu lieu le 5 août 2002.

L'exploitation des spectres s'est faite dans le cadre d'études d'espèces chimiques que IASI devra exploiter lors de sa phase opérationnelle. Parmi ces espèces nous avons étudié l'ozone dans la région spectrale $950 - 1100 \text{ cm}^{-1}$. En effectuant une analyse sur le choix de la base spectroscopique, les fonctions de poids et les noyaux moyens nous avons pu améliorer les simulations des spectres et optimisé la restitution des profils verticaux de l'ozone. Nous avons introduit dans le traitement des spectres, la détermination du nombre de degrés de liberté et l'entropie informationnelle qui permettent de localiser l'information quantitativement et spectralement. Afin de prévoir les performances de l'instrument IASI, les spectres du second vol IASI-ballon ont été dégradés spectralement afin d'obtenir des spectres dit « IASI-like » qui ont la même résolution spectrale que l'instrument IASI et qui prennent en compte la contribution instrumentale. Les spectres « IASI-like » simulant ceux que l'instrument IASI sera sensé pouvoir enregistrer. L'exploitation de ces spectres et la comparaison avec les résultats des inversions des spectres IASI-ballon, donne une idée précise des résultats qui seront obtenus par IASI et des points sur lesquels on peut encore progresser.

Dans la continuité du traitement des spectres infrarouge, d'autres fenêtres spectrales ont été inversées notamment pour des espèces chimiques jouant un rôle dans l'effet de serre ou pour la pollution : méthane (CH_4), protoxyde d'azote (N_2O) et de monoxyde de carbone (CO). Ces molécules d'intérêt atmosphérique sont des constituants minoritaires de l'atmosphère qui jouent un rôle important dans le forçage radiatif terrestre et font partie des gaz à « effet de serre ». La détermination des colonnes totales de ces molécules s'inscrit dans la liste des « produits » opérationnels de l'instrument IASI. L'inversion des colonnes à la résolution de IASI-ballon ainsi qu'à la résolution de IASI permettent de tester les performances des algorithmes qui seront utilisés pour l'exploitation des spectres du futur instrument.

Afin d'améliorer l'inversion des spectres par un meilleur traitement du transfert radiatif, un exercice d'intercomparaison des codes de calcul de transfert radiatif raie par raie est mis en place au sein du Groupe de Travail Scientifique pour le Sondage IASI (GTSSI ou ISSWG en

anglais). Plusieurs équipes de recherche intervenant dans la préparation de la mission IASI participent à cet exercice dont l'objectif est de comparer les différentes méthodes de calcul direct de spectres atmosphériques dans l'infrarouge thermique. Ceci permettra après analyse de souligner les performances des algorithmes en les comparant entre eux et en examinant comment ils reproduisent les spectres atmosphériques dans un cas réel. L'objectif est de voir les points susceptibles d'être améliorés ou ceux qui demandent des études supplémentaires.

Enfin, en parallèle à ce travail une étude de faisabilité pour une cellule à gaz pour tester l'instrument IASI est décrite en dernière partie de ce manuscrit. Cette cellule à gaz conçue et réalisée au LPMA à la demande du CNES a pour but l'étude des performances de l'instrument IASI dans les conditions de fonctionnement nominales et extrêmes et de qualifier la calibration spectrale et radiométrique de l'instrument IASI intégré sur la plate-forme spatiale MetOp. Les simulations décrites dans ce travail ont permis la sélection d'un mélange gazeux bien adapté à la caractérisation spectrale de l'instrument. Afin de permettre l'exploitation des spectres de cuve nous avons décrit le processus de la prise en compte de la transmission des fenêtres en ZnSe de la cellule à gaz, à côté des effets dus à la transmission/émission du mélange gazeux lui-même.

Mon travail a couvert plusieurs aspects. D'un point de vue informatique, j'ai contribué à l'élaboration et l'introduction dans le code LARA de nouveaux outils comme la détermination systématique des fonctions de poids, des noyaux moyens ou de la détermination spectrale de l'entropie informationnelle. Ces outils ont permis d'avoir accès à de nouvelles informations au niveau de la sensibilité spectrale des paramètres inversés améliorant la simulation des spectres et contrôlant la qualité de l'inversion des spectres. Le travail effectué sur les simulations et la sélection des espèces chimiques dans le cadre de la réalisation de la cellule à gaz ont contribué à la mise à disposition du CNES d'un outil permettant de tester de façon efficace les performances de l'instrument IASI.

Image prise depuis la navette spatiale, montrant un lever de Soleil à travers les différentes enveloppes de l'atmosphère.

(Source internet : <http://www.ens-lyon.fr/Planet-Terre/Infosciences/Climats/Structure-atm/Structure/structatm.html>)



CHAPITRE I

Physico-chimie et sondage atmosphérique

L'atmosphère de la planète Terre a toujours été en perpétuelle évolution. Depuis 4,5 milliards d'années elle est passée d'une composition, pour ses principaux constituants, de 80% de vapeur d'eau, 12% de dioxyde de carbone et 5% de diazote, à une composition actuelle de 78% de diazote, 20,9% de dioxygène, 0,9% d'argon et 0,03 % de dioxyde de carbone.

Les causes de cette évolution sont à la fois de nature physique (impacts de météorites, activité volcanique...), mais aussi de nature biogénique (stromatolites, photosynthèse...). Depuis environ un siècle les scientifiques se sont mis à étudier la dynamique et les processus qui déterminent l'état et l'évolution de l'atmosphère terrestre. Aujourd'hui encore la tâche à accomplir reste très importante, mais les outils et les connaissances actuels permettent de

donner quelques réponses quant à l'impact de l'homme sur son milieu et les éventuelles options ouvertes pour que cet impact soit réduit.

Dans cette partie nous nous efforcerons de faire une introduction générale sur l'atmosphère, à la fois sur sa structure, sa composition et les moyens actuels pour en effectuer l'étude. Le but n'est pas de rentrer dans tous les détails de la physique de l'atmosphère, mais de donner une idée sur sa complexité ainsi qu'un aperçu de l'environnement physique et chimique sur lequel a porté ce travail de thèse.

1.1 Structure de l'atmosphère terrestre

1.1.1 Découpage vertical de l'atmosphère.

L'atmosphère terrestre se découpe habituellement en couches délimitées par des niveaux caractéristiques à des altitudes déterminées par la variation du gradient de température. En partant du sol vers les pressions faibles (*Fig. 1.1*), on a tout d'abord la troposphère au sein de laquelle la température décroît régulièrement avec l'altitude pour atteindre un minimum (~190 - 230 K) autour de 10 à 16 km, niveau qu'on définit comme étant celui de la tropopause. La tropopause marque la frontière entre la troposphère et la stratosphère, dans laquelle la température croît progressivement jusqu'à environ 270 K pour une altitude d'environ 50 km. A la limite haute de la stratosphère, on a à nouveau une inversion du signe du gradient et la température diminue dans la région qu'on appelle la mésosphère. La frontière entre la haute stratosphère et la basse mésosphère est appelée la stratopause. Au-delà de la stratopause, à la frontière supérieure de la mésosphère, le gradient de température change à nouveau de signe. La température croît très rapidement dans la couche qu'on appelle thermosphère et peut atteindre des valeurs entre 500 et 2000 K selon l'activité solaire. Les conditions du milieu sont fortement modifiées par rapport aux régions inférieures car la proportion d'oxygène atomique devient un facteur prépondérant.

On peut définir deux grandes parties dans l'atmosphère regroupant les différentes couches précédemment citées. La première regroupe la troposphère, la stratosphère, et la mésosphère. Dans ces couches les composés fondamentaux sont le diazote (N_2) et le dioxygène (O_2). La masse moléculaire moyenne de l'air ne varie pratiquement pas avec l'altitude. Dans ces trois couches le caractère hydrodynamique est le même et on appelle cet ensemble l'homosphère. Par opposition l'hétérosphère regroupe les régions de l'atmosphère au-dessus de

100 km. L'abondance des espèces prépondérantes, varie suivant l'altitude, avec la masse des constituants et on a donc une masse moléculaire moyenne de l'air qui varie avec l'altitude.

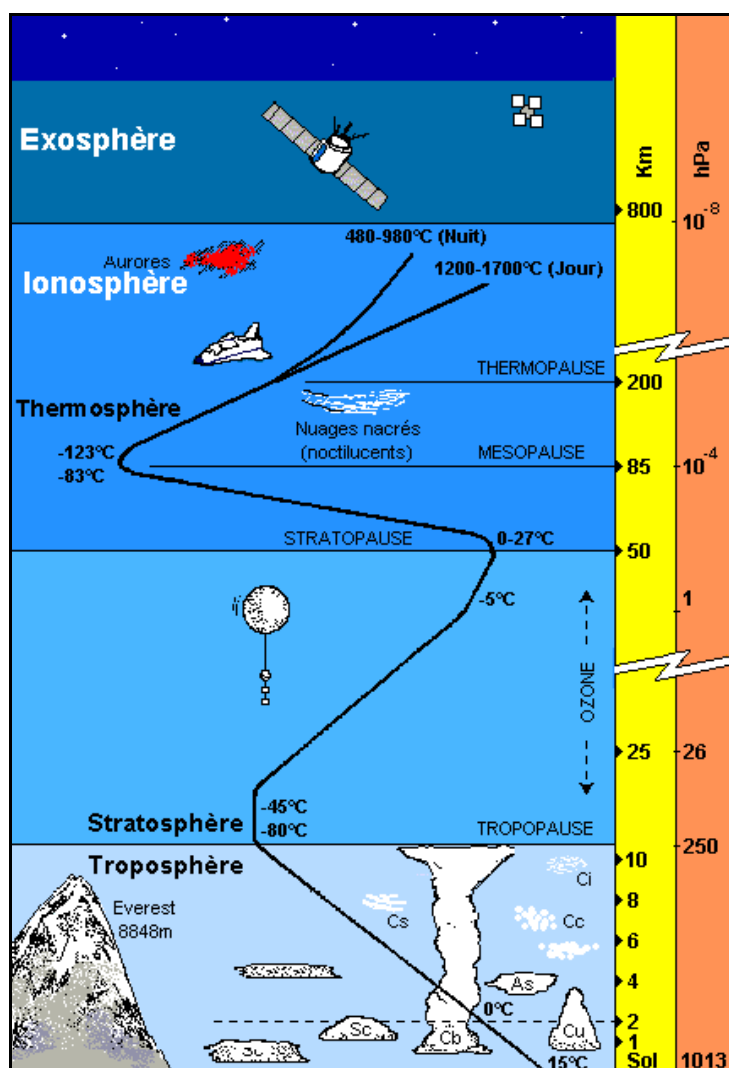


Figure I.1: Découpage vertical de l'atmosphère terrestre en fonction du gradient de température (tracée en noir)

<http://www.astrosurf.com/lombry/meteo-atmosphere.htm>

I.1.2 Nature et dynamique de la basse atmosphère.

En revenant sur la structure de la basse atmosphère, plus particulièrement sur la troposphère, la basse stratosphère et la limite entre ces deux couches : la tropopause, on constate que ce découpage n'est pas quelque chose de figé en fonction de la latitude. La troposphère est caractérisée par son gradient vertical de température négatif et la présence d'eau en quantité importante, sous ses trois formes (vapeur, liquide et solide). On y observe des mouvements verticaux intenses : l'air plus chaud et plus léger s'élève alors que l'air supérieur, plus froid, descend. Entre l'équateur et les pôles, l'épaisseur de la troposphère

varie de 16 km à 8 km (12 km dans les régions tempérées). Quant à la stratosphère située au-dessus de la troposphère, elle possède comme nous l'avons déjà dit un gradient de température positif. La présence de l'eau s'y fait beaucoup plus rare d'où (sauf exception) une absence de nuages au-dessus de l'altitude de la tropopause. La stabilité verticale y est donc très grande car l'air froid, avec une densité plus grande, est situé au-dessous de l'air chaud avec une densité moindre. C'est un domaine stratifié d'où son nom, qui ne favorise pas les échanges verticaux. En revanche, les mouvements horizontaux y sont importants, ce qui permet le transport de constituants sur de longues distances.

La tropopause, limite entre ces deux couches de l'atmosphère, fluctue et est parfois difficile à définir. Selon les conventions de la météorologie, la tropopause est définie comme étant la limite supérieure d'une couche dont le gradient de température est supérieur ou égal à $-0,2 \text{ K}/100 \text{ m}$. Cette couche doit être d'une épaisseur supérieure ou égale à 2 km [BRA82].

En plus de ce découpage vertical on peut aussi définir un découpage horizontal suivant la latitude qui est principalement dû à la dynamique des masses d'air. En effet il existe des mouvements d'air liés à la différence de température entre les différents niveaux de la troposphère, à quoi il faut aussi ajouter les mouvements d'air induits par la rotation de la Terre sur elle-même. On voit ainsi apparaître des cellules d'air dans lesquelles on observe des mouvements cohérents, ces cellules étant séparées par des frontières plus ou moins étanches qu'on appelle barrières dynamiques (*Fig. I.2*). On distingue trois grands types de cellules qu'on retrouve dans chaque hémisphère terrestre : en partant de l'équateur vers les pôles, on a la cellule de Hadley, celle de Ferrel, et la cellule du pôle. A cela s'ajoutent les vents zonaux (Est-Ouest) (*Fig. I.3*) qui font de la troposphère un milieu où la circulation et le brassage de l'air sont importants. On remarque en particulier une circulation d'ouest aux latitudes moyennes et d'est aux basses et hautes latitudes. Mais le passage d'une masse d'air d'un hémisphère à l'autre reste difficile. C'est ainsi que des quantités considérables de fines poussières émises lors de l'explosion du mont Saint Helens (volcan situé au nord-ouest des Etats-Unis) ont fait plusieurs fois le tour du monde, sans quitter l'hémisphère nord.

Les mouvements atmosphériques à la limite de la tropopause conduisent à des échanges entre la troposphère et la stratosphère, permettant ainsi à certains constituants atmosphériques de passer dans la stratosphère et d'y avoir une réactivité et une durée de vie très différentes par rapport à ce qui se passe dans la troposphère. Une revue complète des processus d'échange est présentée par Holton [HOL95]. Ces processus peuvent être représentés en termes de flux à travers la tropopause.

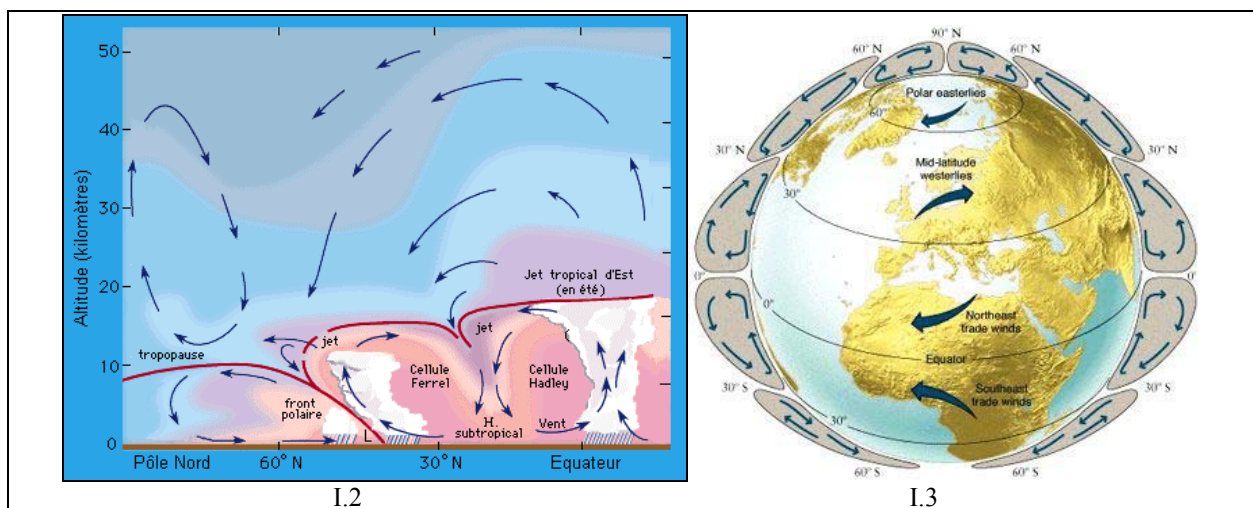


Figure I.2 et I.3 : Représentation des mouvements d'air verticaux en fonction de la latitude pour la basse atmosphère caractérisant la cellule polaire, celle de Ferrel et celle de Hadley, et circulation générale d'un point de vue tridimensionnel avec le mouvement méridien dans les cellules et la composante zonale. (Source Internet : <http://www.astrosurf.com/lombry/meteo-massesdair.htm>)

I.1.3 Transport et échanges entre la troposphère et la basse stratosphère

En ne considérant que le déplacement des molécules et des constituants atmosphériques dans la basse atmosphère et donc en omettant les processus chimiques opérant à ces altitudes, on constate que la durée de vie d'un constituant varie beaucoup en fonction de sa position dans l'atmosphère. Grâce aux gaz traces, espèces chimiques dont la durée de vie d'un point de vue réactionnel est relativement longue par rapport aux phénomènes dynamiques que l'on veut observer, on peut suivre les mouvements des masses d'air en fonction du temps (Fig. I.4). A titre d'exemple le méthane (CH_4) molécule relativement stable chimiquement à une durée de vie moyenne dans l'atmosphère estimée de douze ans [IPC01]. Le phénomène de mélange et de transport joue un rôle important du fait de mouvements de masse d'air induit par effets thermiques et des vents zonaux. En effet la surface de la Terre absorbe le rayonnement solaire de manière beaucoup plus efficace que l'atmosphère. Le réchauffement important de la surface entraîne donc de forts contrastes thermiques. Ceux-ci avec la vapeur d'eau sont à l'origine d'une forte instabilité de la troposphère qui va être continuellement soumise à un fort brassage des masses d'air. De puissants mouvements d'advection verticaux et horizontaux se mettent en place, sur des échelles spatio-temporelles relativement grandes. Il existe donc des échanges entre la couche limite atmosphérique, influencée par la surface, et la troposphère libre, ainsi que des échanges entre troposphère et stratosphère. Les fortes instabilités, dites baroclines, permettent la propagation d'ondes atmosphériques dont la longueur d'onde peut varier de quelques mètres jusqu'à l'échelle terrestre favorisant, elles aussi, le transport de matière.

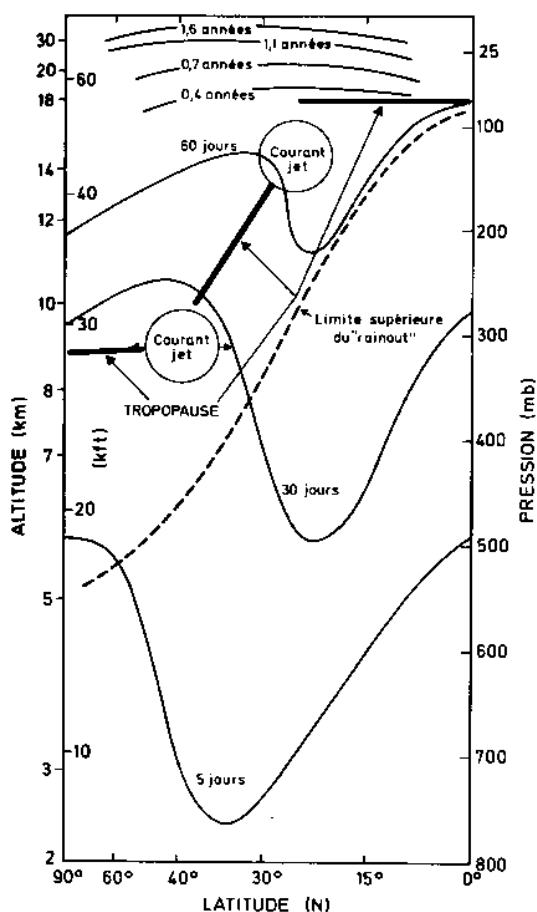


Figure 1.4 : Temps de résidence des particules dans la troposphère et la stratosphère inférieure lié au transport atmosphérique. [REI75]

I.1.4 Les paramètres caractéristiques de l'atmosphère

Deux paramètres apparaissent essentiels à l'étude de la basse atmosphère pour caractériser les couches d'air étudiées : la pression et la température.

En considérant l'air comme étant un gaz parfait, sa pression peut être définie par :

$$p = nkT \quad (1.1)$$

où p est la pression du gaz considéré en pascal (Pa), n est le nombre de molécules par unité de volume, k ($=1,3806503 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$) la constante de Boltzmann et T la température cinétique du gaz en Kelvin. Si l'on soumet ce gaz à un champ de pesanteur et dans l'hypothèse d'où l'équilibre hydrostatique est valable, on peut écrire la variation de pression en fonction de la coordonnée d'altitude:

$$\frac{dp}{dz} = -\rho g \quad (1.2)$$

où g est l'accélération due à la pesanteur (pour la Terre $g = 9.80665 \text{ m.s}^{-2}$ en moyenne au niveau du sol), z l'altitude (m) et ρ la densité totale du gaz (kg.m^{-3}) s'exprimant aussi par :

$$\rho = nm \quad (1.3)$$

le produit entre le nombre de molécules par unité de volume n et la masse moléculaire moyenne m de l'ensemble des constituants atmosphériques. En combinant les expressions (1.1), (1.2) et (1.3) on obtient :

$$\frac{dp}{p} = -\frac{dz}{H} \quad \text{avec} \quad H = \frac{kT}{mg} = \frac{RT}{M_{air}g} \quad (1.4) (1.5)$$

H est défini comme la hauteur d'échelle atmosphérique associée à la pression [CHA61], $R=8,314 \text{ J.mol}^{-1}$ est la constante des gaz parfait et M_{air} la masse molaire moyenne de l'air ($0,029 \text{ kg.mol}^{-1}$). L'intégration de l'équation (1.4) entre les altitudes z_0 et z conduit à la relation :

$$p(z) = p(z_0) \exp\left(-\int_{z_0}^z \frac{dz}{H}\right) \quad (1.6)$$

Cette relation est valable quelque soit le profil de température. Si la hauteur d'échelle H est indépendante de l'altitude, (1.6) devient :

$$p(z) = p(z_0) \exp\left(-\frac{z-z_0}{H}\right) \quad (1.7)$$

La hauteur d'échelle atmosphérique peut ainsi être considérée comme l'altitude requise pour réduire la pression d'un facteur e ($\approx 2,7$). Au niveau du sol H est de l'ordre de 8 km. Lorsque la température est supposée constante et lorsque la variation en fonction de l'altitude de l'accélération de la pesanteur est négligée, il est aisé de voir à partir des relations (1.4) et (1.1) que le contenu total en molécules au-dessus d'une altitude z est donnée par :

$$\int_z^\infty n(z')dz' = n(z)H \quad (1.8)$$

Cette expression est surtout utilisée dans le calcul de l'absorption de rayonnement solaire mais elle permet aussi d'estimer avec une bonne précision la masse totale d'une atmosphère planétaire lorsque la pression P_0 ou le nombre de molécules par unité de volume au sol n_0 , ainsi que l'accélération de la pesanteur et le rayon R de la planète sont connus. On a en effet à partir de (1.8) :

$$\text{Masse totale} \approx n_0 H m 4\pi R^2 = \frac{P_0}{g} 4\pi R^2 \quad (1.9)$$

Le second paramètre, la température, est plus difficile à déterminer. En effet les conditions thermiques de l'atmosphère sont définies par différents processus thermodynamiques liés à la pénétration du rayonnement solaire dans l'atmosphère à travers les

différents constituants qui la composent. La valeur de la température dépend encore de l'émission radiative des différentes molécules présentes, de la libération ou absorption de chaleur par réactions chimiques ainsi que des échanges liés à la dynamique atmosphérique et aux changements d'état de l'eau. Elle peut être déterminée en recherchant toutes les composantes du bilan radiatif dépendant directement de la composition de l'atmosphère.

Enfin on introduit souvent en physique atmosphérique une autre variable, la température potentielle θ . Cela représente la température qu'une parcelle d'air sec à la pression P et à la température T aurait si elle était comprimée de manière adiabatique à la pression de référence $P_0 = 1013,25$ hPa :

$$\theta = T \left(\frac{P_0}{P} \right)^{R/C_p} \quad (1.10)$$

C_p étant la chaleur spécifique à pression constante de l'air ($R/C_p = 0,285$).

Lors du déplacement adiabatique et sans frottement d'un volume d'air, la température potentielle est conservée. Il s'agit donc d'une valeur conservative utile dans la dynamique atmosphérique.

1.2 Climatologie : l'atmosphère d'hier et d'aujourd'hui

1.2.1 L'évolution des espèces chimiques dans l'atmosphère

L'atmosphère de la Terre n'a pas toujours été comme nous la connaissons actuellement principalement au niveau de sa composition chimique. L'apparition de l'atmosphère terrestre résulte d'un dégazage important de magma en fusion et d'un bombardement intense de météorites il y a environ 4,5 milliards d'années. La composition chimique de l'atmosphère dite « primitive » est alors principalement constituée de vapeur d'eau (environ 83%), de dioxyde de carbone (environ 12 %) et de diazote (5 %). On retrouve ce mélange gazeux à partir des gaz volcaniques et des chondrites (météorites). La température est alors élevée mais va baisser ce qui va permettre à la vapeur d'eau de se condenser et former les océans. Débarrassée de la vapeur d'eau, l'atmosphère est alors très riche en CO_2 . Une partie de ce CO_2 se dissout dans l'eau. On estime alors que l'atmosphère contient 60 à 70 % de CO_2 et c'est à la même époque que la vie apparaît ainsi que la photosynthèse (dans les océans). Avec la photosynthèse la teneur en dioxygène va augmenter et celle de dioxyde de carbone diminuer. L'essentiel du CO_2 sera stocké sous forme de calcaire. Ceci a conduit à la

composition chimique de l'atmosphère que l'on connaît aujourd'hui, c'est-à-dire 78% de diazote (N_2), 20,9% de dioxygène (O_2), 0,93 % d'argon (Ar), 0,03% de dioxyde de carbone (CO_2) et la vapeur d'eau apparaît comme un constituant très variable avec une valeur de concentration pouvant varier entre 0 et 1% de l'atmosphère.

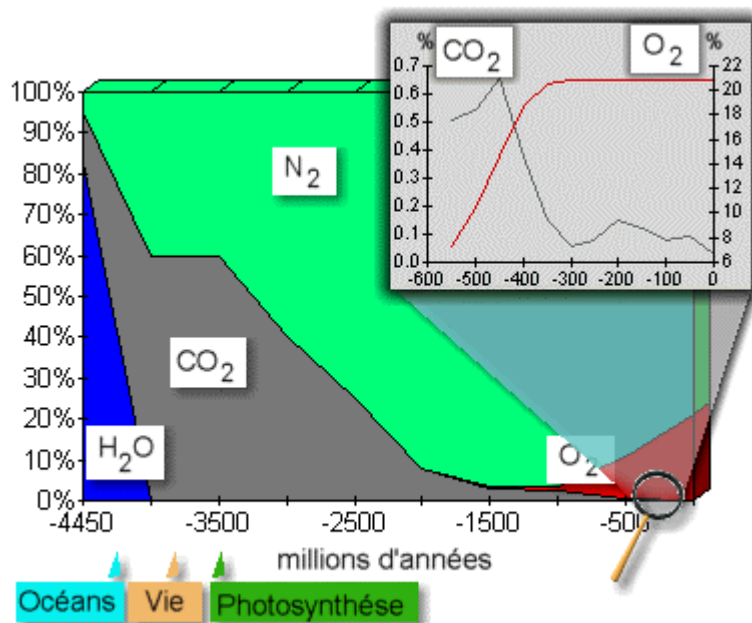


Figure I.5 : Évolution de la composition de l'atmosphère de la Terre depuis sa formation jusqu'à l'époque actuelle.

D'autres espèces chimiques sont apparues avec le temps comme par exemple l'ozone. L'ozone apparaît à cause de deux phénomènes ; une concentration importante de dioxygène dans l'atmosphère et la présence du rayonnement solaire ultra-violet. L'ozone a eu une grande importance pour l'évolution du monde du vivant car il a permis à la vie (jusque là principalement dans les océans), d'émerger et d'occuper les surfaces continentales.

Ainsi des espèces minoritaires en quantité très faible dans l'atmosphère ont un impact primordial pour le monde du vivant. L'atmosphère, de par sa composition et sa physique, est un système extrêmement complexe régi par de multiples interactions entre différents réservoirs (chimie atmosphérique, océans, hydrosphère, cryosphère, biosphère) et dans lequel intervient une très vaste gamme d'échelle de temps (de la journée au million d'années) et d'espace (échelle locale, régionale ou globale). Si on regarde maintenant à une échelle de temps relativement plus petite, on peut aujourd'hui dire que l'activité anthropogénique modifie aussi de manière sensible la composition de l'atmosphère.

Depuis 1750, la teneur en méthane a quasi doublé (151% environ) essentiellement à cause de l'intensification de l'agriculture. L'utilisation des combustibles fossiles est largement

responsable de l'augmentation de la concentration en gaz carbonique depuis le début de l'ère industrielle (accroissement de 30% environ). Ces combustibles fossiles seraient, avec les pratiques agricoles, la cause d'un accroissement voisin de 15% de la teneur de protoxyde d'azote (N_2O) sur la même période de temps. Bien qu'il s'agisse là de constituants mineurs de l'atmosphère, de tels changements sont susceptibles de modifier le climat car ils conduisent à une modification de « l'effet de serre ». Cette propriété de gaz à effet de serre est partagée par divers composés, comme la vapeur d'eau, le dioxyde de carbone ou des composés encore plus minoritaires comme l'ozone et les chlorofluorocarbones (CFC), dont l'emploi s'est développé au cours des deux dernières décennies, ainsi que leur produits de remplacement. Cet effet de serre est en soit bénéfique : il amène la température moyenne à la surface de la Terre à $+15^{\circ}C$ valeur plus clémente pour l'homme que celle estimée à $-18^{\circ}C$, qui prévaudrait si ces gaz n'étaient pas présents dans l'atmosphère. Mais c'est son intensification, largement imputable aux activités humaines, qui inquiète. Ces gaz à effet de serre ont depuis le début de l'ère industrielle augmenté l'énergie moyenne reçue par notre planète de $2,45 \text{ Wm}^{-2}$. Il faut comparer ce nombre à l'apport en énergie provenant du flux solaire absorbé par la surface terrestre (basse atmosphère et surface) qui est en moyenne de 240 Wm^{-2} . Cet apport du à l'effet de serre n'est donc pas négligeable.

Ainsi les gaz de notre atmosphère qu'ils soient minoritaires ou prépondérants, jouent un rôle dans l'équilibre très fragile des conditions d'existence du monde du vivant. Il est donc important à la fois de comprendre comment l'activité anthropogénique agit sur cet équilibre et comment cette évolution s'opère.

1.2.2 L'évolution de la température

Un des paramètres importants pour l'équilibre de la vie et pour celui du climat est la température. L'évolution de la température dans les siècles à venir est un sujet fortement médiatisé et qui apparaît aujourd'hui comme préoccupant quant à la tendance amorcée, c'est-à-dire à l'augmentation de la température au niveau global et aux conséquences que cela entraînerait sur le climat en général (fonte des glaces, précipitations plus importantes et augmentation du niveau des océans). La température résulte principalement de la capacité de notre planète à conserver la quantité d'énergie incidente du Soleil. L'atmosphère terrestre joue un rôle important dans ce réservoir de chaleur grâce à l'effet de serre. D'autres phénomènes naturels que l'on pourrait qualifier d'aléatoires comme les fluctuations de l'activité du Soleil ou les éruptions volcaniques peuvent changer ce bilan d'énergie. C'est ce qu'on appelle le

forçage radiatif qui peut être positif ou négatif suivant que cet apport fait gagner de l'énergie (et donc de la chaleur) à l'atmosphère terrestre, ou lui en fait perdre.

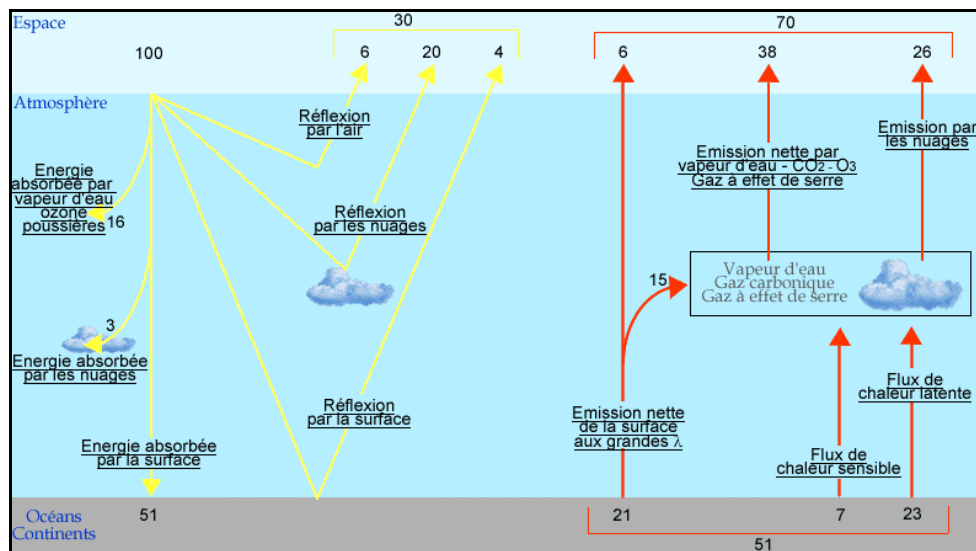


Figure I.6 : L'absorption de la partie non réfléchi du rayonnement solaire (*flèches jaunes*) par l'atmosphère et la surface terrestre réchauffe le système climatique. Pour se refroidir, ce dernier doit émettre de l'énergie vers l'espace sous forme de rayonnement. Cette émission provient de la surface elle-même, mais aussi des nuages et de différentes molécules atmosphériques. Ces corps étant à des températures entre 220 et 300K, cette émission s'effectue dans l'infrarouge (*flèches rouges*). Cette figure résume les transformations de l'énergie solaire incidente et rappelle les différents processus du bilan radiatif terrestre. Les chiffres sont basés sur un flux arbitraire de 100 Wm⁻² au sommet de l'atmosphère. On peut aussi raisonner en pourcentage des 342 Wm⁻² (valeur moyenne annuelle) incidents au sommet de l'atmosphère.

L'effet de serre a joué un rôle dans l'apparition de la vie sur Terre. Le Soleil envoie sur la Terre une énergie lumineuse importante qui pour 70%, est absorbée puis transformée en chaleur dans l'atmosphère, notamment à la surface des océans et des terres émergées. Les 30% restant correspondent à l'énergie réfléchi par la Terre et par l'atmosphère, en grande partie par les nuages (Fig. I.6). Pour assurer un équilibre thermique, la surface terrestre doit renvoyer de l'énergie, essentiellement sous forme de radiations lumineuses de grande longueur d'onde (rayonnement infrarouge du spectre). Or, certains constituants de la basse troposphère sont des molécules susceptibles d'absorber la majeure partie de ce rayonnement infrarouge. Cette énergie captée par les gaz est alors ré-émise sous forme de chaleur. Il se forme ainsi une sorte de couverture gazeuse qui empêche la déperdition d'énergie vers l'espace et donc une conservation de cette énergie renvoyée vers la Terre sous la forme de chaleur. Les principaux constituants des gaz participant à l'effet de serre sont la vapeur d'eau, le dioxyde de carbone,

l'ozone, le méthane, le protoxyde d'azote, et les hydrocarbures halogénés et les composés apparentés.

Ces composés sont produits pour une grande part de manière naturelle mais l'activité humaine depuis le début de l'ère industrielle a conduit à la production d'une grande quantité de ces composés de manière directe ou indirecte ainsi qu'à celle de composés nouveaux ayant un fort pouvoir d'effet de serre comme l'ozone au niveau de la troposphère. La figure I.7 illustre le forçage radiatif dû aux activités naturelles et anthropogéniques depuis l'ère industrielle. Nous avons de nos jours une assez bonne compréhension de l'incidence des gaz à effet de serre sur le forçage radiatif, contrairement à l'impact de l'activité solaire ou de la contribution de la combustion d'hydrocarbures des avions dans la haute troposphère. Ce qui est clair, c'est que depuis 1750 c'est que le bilan du forçage radiatif est positif, c'est à dire, que l'atmosphère reçoit de l'énergie sous forme de chaleur et que celle-ci est conservée dans l'atmosphère. Bien qu'il subsiste encore de grandes incertitudes sur certains phénomènes, se traduisant sur la figure par les barres verticales, on peut dire que le bilan du transfert radiatif est positif et que la tendance est à une augmentation de la température globale.

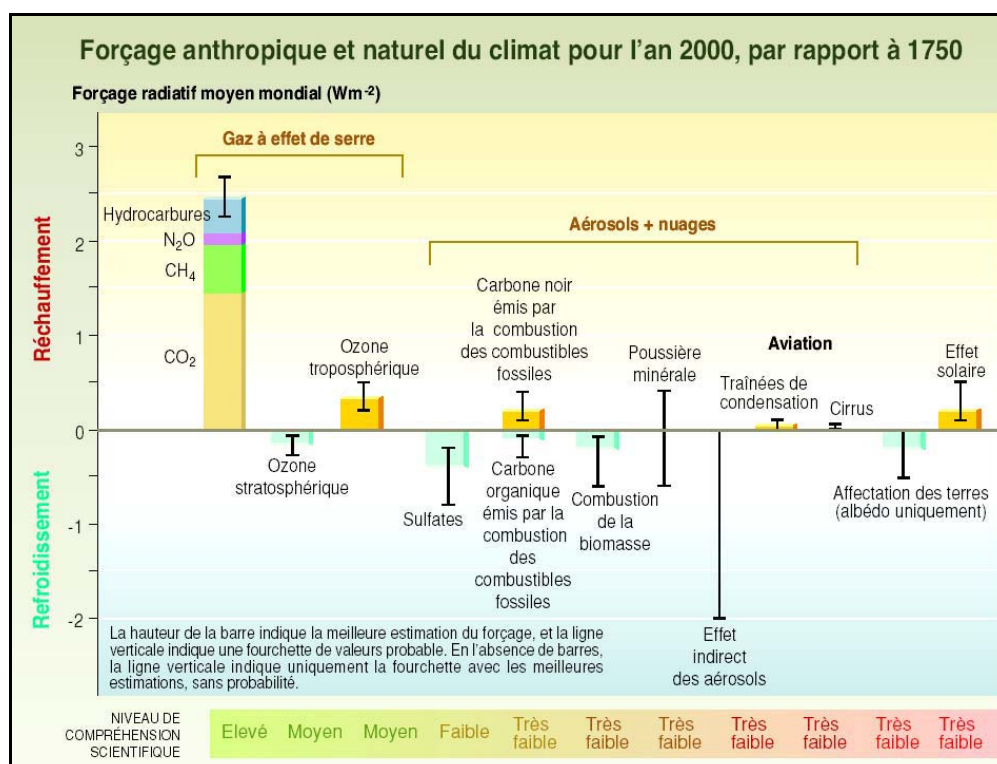


Figure I.7 : Forçage radiatif global du système climatique en l'an 2000 par rapport à 1750. [IPCC01]

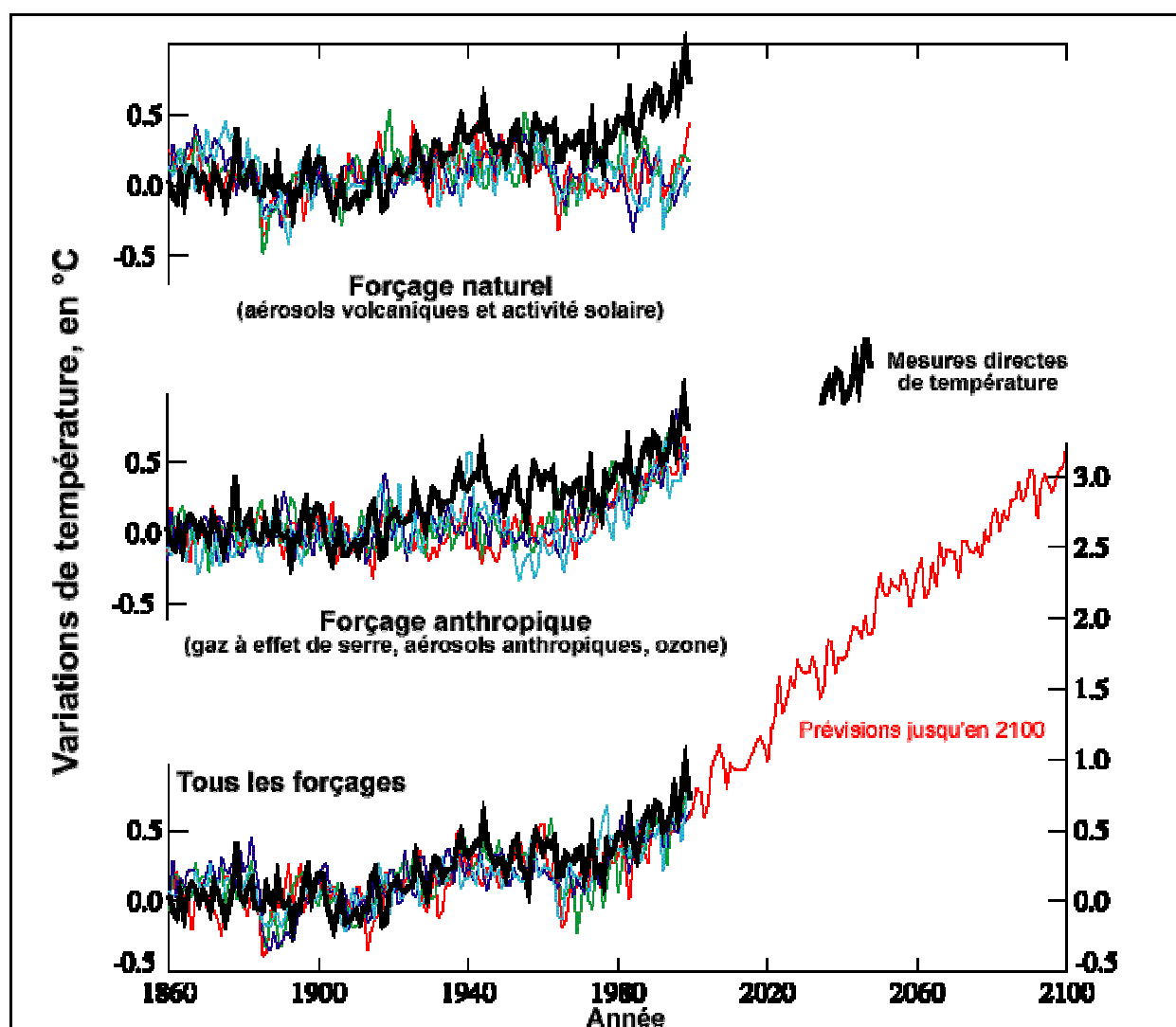


Figure I.8 : Anomalies des températures moyennes mondiales à la surface, par rapport à la moyenne de la période 1880 à 1920, tirée des relevés météorologiques, comparées à des séries de quatre simulations avec un modèle climatique couplé océan-atmosphère, avec a) uniquement les forçages solaires et volcaniques, b) les forçages anthropiques, notamment de gaz à effet de serre bien mélangés, des changements dans l'ozone stratosphérique et troposphérique et les effets directs et indirects des aérosols sulfatés, et c) tous les forçages, naturels aussi bien qu'anthropiques. La courbe foncée représente les données expérimentales et les courbes plus fines les différentes simulations issues de 4 modèles différents. Il convient de noter que les données sont des valeurs annuelles moyennes. Les données des modèles sont échantillonnées uniquement aux endroits où des observations sont disponibles. Les changements des aérosols sulfatés ont été calculés interactivement tandis que ceux de l'ozone troposphérique ont été calculés de façon non interactive avec un modèle de transport chimique. Les changements dans la réflectance des nuages (qui est le premier effet indirect des aérosols sulfatés) ont été calculés par des simulations expérimentales et inclus dans le modèle. Les changements dans l'ozone stratosphérique étaient basés sur des observations. Les forçages volcaniques et solaires étaient basés sur des combinaisons de mesures publiées et de données indirectes. Le forçage anthropique net en 1990 était de $1,0 \text{ Wm}^{-2}$, incluant un refroidissement net de $1,0 \text{ Wm}^{-2}$ dû aux aérosols sulfatés. Le forçage naturel net pour 1990 par rapport à 1860 était de $0,5 \text{ Wm}^{-2}$. Pour 1992, il a conduit à un refroidissement net de $2,0 \text{ Wm}^{-2}$ dû au mont Pinatubo. [\[IPC01\]](#)

Nombre de phénomènes participant au forçage radiatif sont d'origine purement naturelle et/ou totalement indépendante comme l'activité solaire. Mais certains de ces acteurs du forçage radiatif sont à la fois d'origine naturelle et humaine. C'est pourquoi, il est important de savoir si le réchauffement global est de nature anthropogénique ou s'il résulte d'un changement du climat comme la planète en a connu par le passé. De nombreux modèles ont été élaborés pour répondre à cette question. Diverses simulations ont été effectuées en déterminant l'évolution de la température globale à la surface de la Terre en ne considérant que l'impact du forçage radiatif naturel d'une part et que le forçage radiatif de nature anthropogénique de l'autre. En comparant avec les mesures directes de température depuis 1860, on constate que l'accord existe dans les prédictions si le modèle prend en compte le forçage dû à l'activité humaine et surtout aux gaz à effet de serre rejetés par celle-ci (*Fig. 1.8*). En extrapolant les simulations, ces modèles prévoient d'ici 2100 une augmentation globale de la température de plusieurs degrés couvrant une gamme de 0,5 à 7°C. Cette si grande incertitude dans les prédictions est due à une connaissance encore insuffisante de certains phénomènes et aussi à la prise de conscience et aux décisions socio-économiques possibles des gouvernements face à ces modifications de l'environnement. En combinant tous ces facteurs il reste difficile de prévoir avec précision l'évolution du climat. Mais on a au moins une certitude d'après les modèles actuels, il semble que le changement climatique à venir soit inéluctable et qu'il se traduise par un réchauffement global, mais l'intensité et la vitesse d'évolution du phénomène restent à préciser.

Un des facteurs le plus important agissant sur le bilan radiatif n'est autre que l'abondance des gaz à effet de serre. Le méthane (CH₄), le dioxyde de carbone (CO₂), l'ozone troposphérique (O₃) et protoxyde d'azote (N₂O) en sont les principaux responsables. On parle généralement de ces espèces comme étant des gaz sources (s'ils sont directement émis à la surface) ou de polluants s'ils résultent de transformations chimiques. La concentration d'une espèce mesurée en un lieu est fonction des sources et des puits correspondant. Les sources correspondent aux émissions locales et aux flux apportés par les mouvements météorologiques. Les puits correspondent aux transformations chimiques de cette espèce qui conduisent à sa disparition. La chimie atmosphérique est une chimie complexe et il reste difficile de trouver une solution aux problèmes de l'effet de serre en essayant de réguler la concentration de l'une ou l'autre de ces espèces.

I.2.3 La chimie atmosphérique actuelle

L'objectif de ce paragraphe n'est pas de donner au lecteur une description de l'ensemble de la chimie de la troposphère et la basse stratosphère. Notre but est de montrer les principaux mécanismes menant à la création et/ou la destruction de l'ozone, ainsi que l'apport de la chimie sur l'effet de serre. Pour plus de détails sur la chimie atmosphérique nous recommandons l'ouvrage de J.H. Seinfeld [\[SEI97\]](#). La source principale d'ozone à l'échelle globale est sa formation naturelle dans la stratosphère où l'on trouve 93% du contenu global en ozone. La troposphère contient les 7% restant.

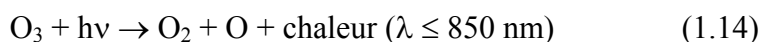
➤ Dans la stratosphère, où le rayonnement solaire dans l'ultraviolet de longueur d'onde inférieure à $\lambda=242.4$ nm n'a pas encore été absorbé, les molécules de dioxygène (O_2) peuvent être dissociées en deux atomes d'oxygène (O) suivant le processus :



L'oxygène atomique ainsi libéré peut conduire à la formation de l'ozone par la réaction :



Le symbole M représente ici ce qu'on appelle le troisième corps (nécessaire à la conservation de l'impulsion) et qui emporte une partie de l'exothermicité de la réaction. L'ozone ainsi formé peut être soit attaqué par l'oxygène atomique, soit photodissocié, suivant les processus :



Les quatre réactions introduites ci-dessus constituent le mécanisme proposé par Chapman [\[CHA31\]](#) pour expliquer la présence de l'ozone dans l'atmosphère terrestre et ce modèle simple permet de montrer la présence d'un maximum de la concentration d'ozone dans la stratosphère puisque le processus (1.11) devient inexistant à basse altitude alors que le processus (1.12) devient inefficace à faible pression.

Toutefois ce mécanisme ne permet pas à lui seul de comprendre les distributions d'ozone atmosphérique observées. En effet, même en introduisant des phénomènes dynamiques réalistes, la modélisation de l'ozone dans une « atmosphère d'oxygène » ne permet de rendre compte de la concentration observée (sur estimation du modèle par un facteur ~ 2). La chimie de l'ozone stratosphérique est beaucoup plus complexe que le mécanisme de Chapman. Parmi les processus intervenant dans le bilan de l'ozone on a considéré les cycles catalytiques liés aux oxydes d'azote NO_x [CRU70] destructeur d'ozone, puis les chlorofluorocarbones (CFC) [ROW75], dérivés chlorés et fluorés des hydrocarbures. Les CFC sont très stables chimiquement et utilisés dans l'industrie depuis 1960 comme propulseurs d'aérosols, ils se retrouvent mélangés de manière homogène dans la troposphère. Une partie est injectée dans la stratosphère. Les CFC vont alors être détruits par le rayonnement UV solaire pour libérer des atomes de chlore destructeurs d'ozone. L'importance de la chimie hétérogène dans la stratosphère polaire a aussi été mise en évidence et intégrée dans les modèles.

➤ Au niveau de la troposphère l'ozone est un polluant secondaire résultant de l'oxydation d'oxygène moléculaire avec des polluants primaires. L'oxydation nécessite la présence dans la troposphère d'oxygène atomique provenant de la photodissociation du dioxyde d'azote (NO_2) à une longueur d'onde de 400 nm.



La cinétique de (1.16) est très rapide et le monoxyde d'azote (NO) réagit presque aussi tôt avec l'ozone :



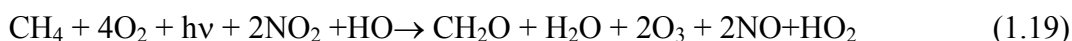
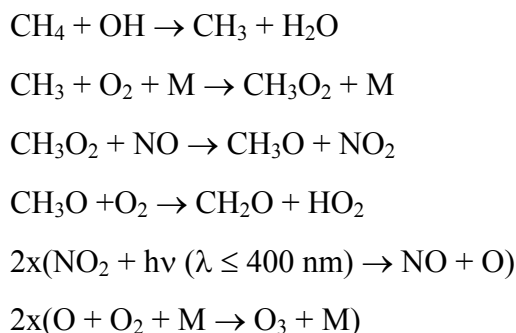
Toutefois, le dioxyde d'azote et l'ozone peuvent réagir de la façon suivante :



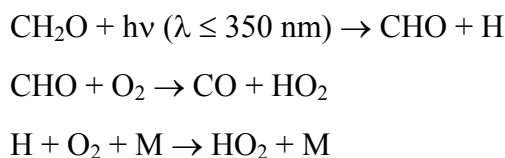
La photodissociation (on dit aussi photolyse) de NO_2 n'ayant lieu que durant les journées ensoleillées, durant la nuit il n'y a pas de production de NO. Par conséquent, la concentration de NO_2 diminue, sa photolyse aussi, et il ne se forme plus beaucoup d'ozone. La photolyse de l'ozone (O_3), conduisant à la formation de radicaux hydroxyle OH, se voit là aussi diminuée. C'est pourquoi on constate une diminution de l'ozone lorsqu'il n'y a pas assez

d'oxydes d'azote comme NO et NO₂ (que l'on nomme aussi comme étant les NO_x). C'est une situation de puits « d'ozone ».

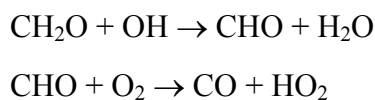
Les radicaux hydroxyle réagissent avec le méthane (CH₄) dans une succession de réactions :



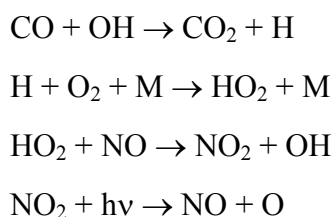
Il y a donc formation nette de O₃ au cours de l'oxydation de CH₄ et plus généralement des hydrocarbures. Le formaldéhyde CH₂O formé par (1.19) se photodissocie :



ou réagit avec OH



Le monoxyde de carbone CO réagit avec le radical OH donnant une nouvelle chaîne de réactions :





La conclusion des réactions bilans (1.19), (1.20) et (1.21) est la formation ozone (O_3) dans la partie troposphérique à partir de méthane (CH_4) ou de monoxyde de carbone (CO). On dit que CH_4 et CO sont des précurseurs de l'ozone.

En ce qui concerne la distribution d'ozone troposphérique, elle résulte d'une consommation par absorption, par réaction à la surface ou sur la végétation. Ce sont des processus non négligeables puisqu'ils peuvent représenter jusqu'à 33% de l'ozone détruit dans la troposphère [MOU98].

	CO ₂ (dioxyde de carbone)	CH ₄ (méthane)	N ₂ O (oxyde nitreux)	CFC-11 (chlorofluoro- carbure-11)	HFC-23 (hydrofluoro- carbure-23)	CF ₄ (perfluoro méthane)
Concentration pré-industrielle	Environ 280 ppm	Environ 700 ppb	Environ 270 ppb	Zéro	Zéro	40 ppt
Concentration ^a en 1998	365 ppm	1745 ppb	324 ppb	268 ppt	14 ppt	80 ppt
Changement du taux de concentration	1,5 ppm/an	7,0 ppb/an	0,8 ppb/an	- 1,4 ppt/an	0,55 ppt/an	1 ppt/an
Temps de séjour atmosphérique	ans ^b	12 ans ^c	114 ans ^c	45 ans	260 ans	> 50 000 ans

Tableau I.1 : Principaux gaz à effet de serre et influence des activités humaines [IPC01]

^a ppm partie par 10⁶ molécules ; ppb partie par 10⁹ molécules ; ppt partie par 10¹² molécules.

^b Aucun temps de séjour unique ne peut être déterminé pour CO₂ en raison des différents taux d'absorption et processus d'élimination.

^c Ce temps de séjour a été défini comme un temps de relaxation qui tient compte de l'effet indirect du gaz sur son propre temps de séjour

Tous ces mécanismes de création ou de destruction d'ozone se produisent de manière naturelle que ce soit la photolyse de l'ozone dans la stratosphère ou la production d'ozone à partir de ses précurseurs dans la troposphère. Le problème est que l'activité humaine libère (Tabl. I.1) des gaz intervenant dans cette chimie et conduisant ainsi à une production importante d'ozone dans la troposphère, ce qui conduit à des pics de pollution par l'ozone néfastes pour la santé. La création d'ozone dans la troposphère induit aussi un réchauffement ce qui classe l'ozone comme un gaz à effet de serre. La destruction de l'ozone stratosphérique

menant au phénomène de « trou de la couche d'ozone » résulte aussi de l'activité anthropogénique.

En plus d'être des précurseurs d'ozone certaines espèces sont des gaz à effet de serre comme CH_4 ou N_2O , ce qui conduit à accentuer, par le biais de la production anthropique, l'augmentation de la température au niveau global. L'impact de la production anthropique de gaz à effet de serre et de gaz favorisant la destruction de l'ozone stratosphérique est préoccupant, car la cinétique de destruction est rapide et le temps de séjour de certaines espèces est très grand.

1.3 Les méthodes de sondage atmosphérique à distance

1.3.1 Les méthodes de mesure des constituants atmosphériques

L'objectif de ce paragraphe est de passer en revue les méthodes spectroscopiques développées dans le domaine infrarouge du spectre électromagnétique permettant la mesure des constituants et des polluants qui constituent notre atmosphère. Les spectres infrarouges sont un outil puissant pour mesurer précisément les concentrations d'espèces à l'état de trace par l'utilisation des signatures spectrales caractéristiques des différentes espèces moléculaires, qui sont associées aux bandes de vibration-rotation dans le moyen ou proche infrarouge. Différentes méthodes basées sur la spectroscopie quantitative permettent de réaliser des mesures troposphériques ou stratosphériques : absorption à long parcours *in situ*, absorption/émission atmosphérique par spectroscopie avec des instruments à haute résolution spectrale au sol ou embarqués à bord d'avions, de ballons ou de satellites. Il est possible de classer les différentes méthodes de mesure selon une grande variété de critères (plusieurs classifications sont donc possibles). Nous avons choisi une classification suivant le tableau ci-dessous (*Tabl. 1.2*) qui distingue les méthodes selon leur type (*in situ* ou à distance), selon la technique utilisée (classique ou laser) et selon la plate-forme à partir de laquelle elles sont mises en œuvre [\[CAM01\]](#).

	Catégorie	Technique/Domaine	Exemple/Référence
Type	<i>In situ</i>	échantillonnage méthode chimique	CO ₂ [NAK95] , CFC [PAT00]
		spectrométrie de masse	O ₃ [ANC97] O ₃ [KRA00]
Type	A distance	Spectroscopie :	
		passive active (lidar)	[FIS96] , [WET95] , [BLO94] O ₃ [GOD89] , [ANC97]
Technique spectroscopique	Spectroscopie classique	MW, sub-mm, FIR Infrarouge UV-vis	ClO, HCl [KUN99] , [CAR92] , [STA92] , [JOH95] [GOO00] O ₃ , SO ₂ , NO ₂ [HOF95] , [CAM96] , [REN96] , BrO [HAR98]
	Spectroscopie laser	Laser FIR, hétérodynage Diode laser MIR, NIR Laser UV-vis	O ₃ [SCH94] , CH ₄ [KOI95] , OH [ENG00] [MOR97] , [DUR99] OH [BÖC99]
Plate-forme	Sol Avion Ballon Satellite artificiel	In situ / à distance In situ / à distance In situ / à distance A distance	[WHI42] , [HER64] [WEB94] , [CHO99] , [GIE99] [WEB87] , [MOR97] [BRO92]

Tableau I.2 : Classification des différentes méthodes de mesure

On utilise les notations consacrées : MW= micro-onde (microwave), FIR= infrarouge lointain (far infrared), MIR= infrarouge moyen (mid-infrared), NIR= proche infrarouge (near infrared), UV-vis= ultraviolet-visible

Toutes les méthodes ne seront pas traitées en détail, mais on fournit, à titre d'exemple une référence pour celles centrées sur les techniques spectroscopiques passives dans l'infrarouge.

I.3.2 Les mesures optiques *in situ*.

Les mesures à long parcours au niveau du sol sont brièvement mentionnées ici. Il s'agit d'analyser spectralement le rayonnement d'une source à spectre continu (corps noir dans l'infrarouge, lampe halogène dans l'UV-vis), dont le rayonnement est absorbé le long du trajet optique par les molécules présentes dans l'atmosphère. La technique est appliquée pour la mesure par spectroscopie d'absorption de polluants urbains, soit dans la région visible - UV par spectrométrie de Fourier ou à réseau, soit dans la région infrarouge par spectroscopie de Fourier. A titre d'exemple, les abondances de HCl [\[OPP98\]](#) et SO₂ [\[YOU98\]](#) ont été déterminées par cette technique dans les panaches d'un volcan. La même technique est appliquée pour les mesures de concentration de polluants ou effluents à la sortie des cheminés

thermiques ou d'incinération [HAU94]. Les mesures spectroscopiques *in situ* peuvent aussi être réalisées à bord d'avions ou de ballons. Afin d'augmenter le parcours d'absorption pour le dosage d'espèces dont la concentration est dans la gamme du ppm (parties par million) au ppb (parties par milliard), on utilise à bord d'avion des cellules à réflexions multiples avec prise d'air et circulation dans la cellule d'absorption. Deux techniques sont applicables pour l'analyse spectroscopique des constituants de l'air atmosphérique circulant dans la cellule d'absorption : la spectroscopie de Fourier dans l'infrarouge moyen [GOO00] et la spectroscopie à diode laser accordable (TDLS = Tunable Diode Laser Spectroscopy) [SCHI99], [WEB94]. Pour les espèces comme N₂O, CO, HNO₃ des précisions de l'ordre de 2%, 5%, et 10% sont respectivement obtenues pour un temps d'intégration de quelques secondes dans la gamme d'altitude des avions spécialisés dans ce type de mesures *in situ*. Dans ce cas, le temps de transit dans la cellule qui est déterminé par les pompes et débitmètres contrôlant la circulation de l'air dans le système est le paramètre important. Les avions qui portent l'instrumentation pour mesurer la composition atmosphérique sont des avions de ligne, des avions commerciaux adaptés à la recherche atmosphérique mais dont le plafond maximum est limité à 10-12 km ou des avions spécialisés (ER-2, M-55) pour accéder à la stratosphère [WEB94]. Dans tous les cas, une caractéristique du porteur avion est sa capacité à « échantillonner » de façon très contrôlée (*in situ* ou à distance) la masse d'air intéressante. Les techniques ainsi mises en œuvre sont elles-mêmes utilisables pour étudier des rejets des réacteurs d'avions dans l'atmosphère [FAH95], [HAS96].

La mesure *in situ* par spectroscopie diode laser peut être adaptée à des expériences sous ballon stratosphérique, et la cellule à long parcours est alors complètement ouverte à l'air ambiant. A titre d'exemple, citons l'expérience SPIRALE (SPectroscopie InfraRouge par Absorption de Laser Embarqué) destinée à la mesure de CO et O₃ dans la stratosphère [MOR97] avec des diodes laser de sel de plomb émettant dans l'infrarouge moyen et l'expérience SDLA (Spectroscopie par Diode Laser Accordables) développée pour mesurer la concentration de CH₄ et H₂O dans la haute troposphère et la stratosphère [DUR99] avec des diodes laser qui émettent dans le proche infrarouge. Dans la première expérience, les diodes sont refroidies à l'azote liquide, ce qui est contraignant, mais on accède aux bandes fondamentales des différentes molécules qui sont en général plus intenses ; dans la deuxième expérience, les diodes sont contrôlées en température par effet Peltier au voisinage de la température ambiante, ce qui est pratique, mais les bandes harmoniques ou de combinaison dans l'infrarouge proche sont plus faibles, et donc des techniques particulières de modulation et de détection du signal doivent être mises en œuvre pour atteindre la gamme du ppbv.

I.3.3 Les mesures à distance.

Même sans chercher à échantillonner localement le milieu atmosphérique, des méthodes passives à distance peuvent fournir des informations sur la distribution des espèces par l'analyse spectroscopique du rayonnement absorbé, émis ou diffusé par l'atmosphère. Ces méthodes requièrent, d'une part de disposer d'un spectromètre (à transformée de Fourier ou à réseau) opérant à partir d'une plate-forme appropriée, et d'autre part de développer un algorithme d'inversion permettant, à partir des spectres observés, de restituer un profil vertical (ou colonne le long de la ligne de visée) de l'espèce atmosphérique à mesurer.

Les mesures passives à distance à partir du sol sont en général réalisées par des stations d'observation à vocation atmosphérique. Les instruments utilisés sont des spectromètres à transformée de Fourier dans l'infrarouge moyen ou dans l'infrarouge proche, des spectromètres à réseau dans l'UV-vis ou plus rarement des spectromètres par hétérodynage. Ces spectromètres visent une source naturelle (le soleil en général, mais aussi la lune ou certaines étoiles) lorsqu'ils opèrent en absorption. Ils peuvent collecter le rayonnement émis par l'atmosphère dans l'infrarouge thermique ou le rayonnement diffusé vers le bas (en général visée au zénith) dans le domaine visible - UV¹. Dans le premier cas, les spectromètres de Fourier dans l'infrarouge à haute résolution spectrale (environ $0,002 \text{ cm}^{-1}$) opèrent en absorption solaire dans des observatoires ou dans des sites du réseau de stations NDSC (Network for Detection of Stratospheric Change). Les avantages de ces instruments sont le grand domaine spectral couvert (conduisant à la mesure simultanée de nombreuses espèces), le rapport signal sur bruit élevé (atteint par l'utilisation du soleil comme source) et la possibilité d'obtenir de longues séries temporelles permettant d'établir des tendances à moyen ou long terme des espèces intéressant la chimie stratosphérique (ou troposphérique). Avec cette technique, on accède facilement à une colonne verticale, mais on peut aussi obtenir une information sur la distribution verticale par inversion des signatures spectrales bien isolées de certaines espèces comme CO. Dans ce dernier cas, l'utilisation du soleil comme source complique l'analyse. En effet, il faut modéliser le spectre incident avant la traversée de l'atmosphère terrestre, puisque CO est également un constituant de la photosphère solaire.

¹ Pour citer les instruments atmosphériques récents opérant à bord du satellite ENVISAT, MIPAS est un spectromètre de Fourier opérant dans l'infrarouge thermique, SCIAMACHY et GOMOS utilisent des spectromètres à réseau dans l'UV-vis, mais SCIAMACHY couvre aussi, avec des spectromètres à réseau, 2 canaux de l'infrarouge courte longueur d'onde (dit « canaux infrarouges »)

De façon générale, dans le cas d'observations à partir du sol, deux facteurs sont pénalisants. La résolution verticale intrinsèque est assez faible, même si les méthodes d'inversion, basée sur l'analyse détaillée de l'information contenue dans la forme des raies observées à haute résolution spectrale, permettent d'accéder à un profil de l'espèce recherchée. Pour la mesure d'espèces stratosphériques, le rayonnement intéressant doit traverser toute la basse atmosphère (où la concentration de H₂O est élevée) ce qui limite les mesures à certaines fenêtres de « transparence » atmosphérique (ou à leur voisinage). Ces contraintes expliquent pourquoi on cherche aussi à réaliser des mesures à distance à partir de plates formes aéroportées.

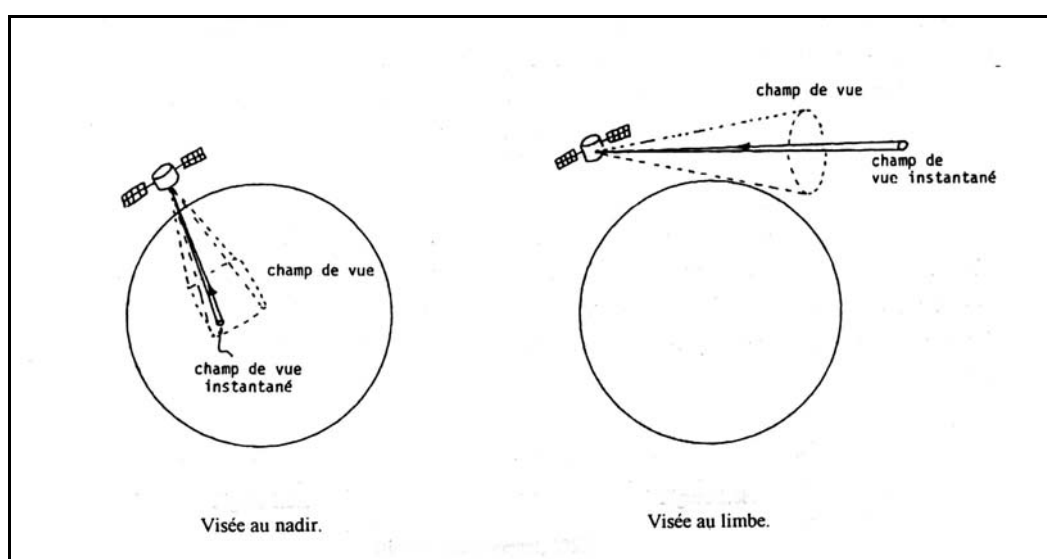


Figure I.9 : Champ de vue d'instruments de sondage satellitaire.

Une plate-forme aéroportée emportant un spectromètre à haute résolution spectrale permet une meilleure géométrie d'observation pour les mesures à distance que depuis le sol. Elle a l'avantage de couvrir des zones géographiques plus étendues et permet l'accès à l'information à des altitudes assez élevées. L'un des inconvénients est la faible durée de l'expérience limité par l'autonomie d'un avion en vol ou la zone de vol du ballon. Toutes les méthodes décrites jusqu'ici ne permettent pas des mesures globales car elles sont limitées dans le temps et l'espace : un spectromètre pour la mesure de constituants atmosphériques à partir d'une station sol, ne fait d'observation qu'au voisinage du site, avec une capacité limitée à obtenir des profils verticaux ; un spectromètre embarqué sur un avion peut faire des observations le long d'une trajectoire contrôlée mais ne permet d'accéder qu'à un domaine d'altitude restreint ; un spectromètre sous ballon stratosphérique permet une plus grande

gamme d'altitudes lors de l'ascension mais ne réalise des mesures qu'autour d'une zone limitée. La nécessité d'observations plus globales, pour mieux comprendre le fonctionnement du système atmosphérique dans son ensemble, conduit naturellement à la mise en œuvre d'instruments embarqués sur satellites, pour le sondage à distance de la composition de l'atmosphère. Il existe deux formes de géométrie d'observation à partir de ballon ou de plateforme satellitaire. La visée au limbe (*Fig. I.9*) consiste à observer quasi-horizontalement les couches de l'atmosphère en visant ou en occultant un astre comme le Soleil, la Lune ou une étoile. Cette méthode permet d'obtenir une bonne résolution verticale tout en bénéficiant du facteur d'amplification des trajets optiques au voisinage de la couche tangente. Cette géométrie est utilisable en émission thermique en particulier grâce aux spectromètres refroidis. L'autre forme de géométrie utilisée est la visée au nadir consistant à « regarder » verticalement les couches de l'atmosphère (*Fig. I.9*). Les sondeurs en visée au nadir n'ont pas la résolution verticale intrinsèque liée aux visées au limbe. Ils bénéficient en revanche d'une bonne résolution horizontale et sont les successeurs des imageurs utilisés pour la météorologie ou l'observation de la Terre, auxquels ils sont supérieurs par des performances notablement accrues en matière de résolution spectrale (qui permet une certaine résolution verticale en utilisant la variation des épaisseurs optique dans le spectre). Le domaine de l'ultraviolet est couramment utilisé dans la géométrie de visée au nadir pour obtenir de l'information sur la distribution de l'ozone dans l'atmosphère. Depuis la première détection du « trou » d'ozone au-dessus de l'Antarctique, l'instrument TOMS (Total Ozone Mapping Spectrometer) dresse de façon opérationnelle des cartes (presque) globales de la colonne totale d'ozone et permet d'estimer les tendances à long terme. Un des inconvénients majeurs des instruments fonctionnant dans l'ultraviolet et qui collectent les photons solaires rétro-diffusés vers le haut est qu'ils ne travaillent que le jour. Ils ne fournissent donc pas de données dans les zones de nuit polaire. Les instruments infrarouges en visée au nadir ne sont pas limités aux mesures de jour uniquement. Les sondeurs infrarouges au nadir de la nouvelle génération possèdent une résolution spectrale relativement bonne de l'ordre de 1 cm^{-1} pour AIRS (Atmospheric InfraRed Sounder) et de $0,5 \text{ cm}^{-1}$ pour IASI (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer). Ils doivent permettre le sondage troposphérique de la température et de la vapeur d'eau avec une très bonne précision (1 K et 10% pour une résolution verticale de 1 km).

Le Laboratoire de Physique Moléculaire et Applications (LPMA) a développé l'instrument IASI-ballon permettant à partir d'un ballon stratosphérique, d'enregistrer des spectres atmosphériques en émission thermique (mode spectro-radiométrique) par visée au nadir avec une résolution de $0,1 \text{ cm}^{-1}$. IASI-ballon permet de préparer les missions qui auront

pour cible principale la troposphère comme AIRS, IASI ou TES (Tropospheric Emission Spectrometer). IASI-ballon est l'illustration de l'interaction étroite entre les ballons (qui permettent de valider les choix instrumentaux qui seront ensuite embarqués sur satellite) et les expériences spatiales. La préparation des algorithmes d'inversion pourra utiliser des données acquises sous ballon et la validation des profils sera aussi réalisée par des expériences dites corrélatives, lorsque le satellite sera en orbite, ce qui par la suite conduira à des campagnes de ballon spécifiques.

I.3.4 Perspectives des instruments et des mesures.

De nombreuses techniques sont utilisables pour la mesure des constituants ou des polluants atmosphériques. Parmi celles qui sont les plus performantes et qui permettent la mesure simultanée d'un grand nombre d'espèces figure la spectroscopie moléculaire quantitative. Les mesures passives à distance par spectroscopie infrarouge ne permettent pas de couvrir toutes les espèces puisque certains constituants n'ont de signature spectrale observable que dans le domaine micro-onde (comme ClO) ou dans le domaine de l'UV-vis (comme BrO). La spectroscopie infrarouge reste pourtant un outil très efficace grâce aux progrès de l'instrumentation de type spectromètre de Fourier et du fait du grand nombre d'espèces mesurables et de sa sensibilité élevée. Les mesures *in situ* constitueront toujours une référence (parce qu'on accède directement au milieu gazeux dont on analyse localement la composition), mais seules les mesures à distance permettent une vision globale de l'atmosphère grâce aux instruments embarqués sur satellite.

Le principe même des mesures à distance nécessite une connaissance précise des propriétés spectroscopiques des molécules sondées. Les travaux expérimentaux d'enregistrement des spectres à haute résolution ainsi que les travaux théoriques associés à leur analyse détaillée, travaux qui sont réalisés dans les laboratoires de spectroscopie moléculaire, permettent d'étendre et d'améliorer les banques de données spectroscopiques utilisées pour la modélisation des spectres atmosphériques. Ils sont donc essentiels pour les inversions de plus en plus fiables et précises des signatures spectrales afin de restituer la distribution des constituants correspondants. Le futur (une dizaine d'années) verra l'utilisation plus courante des techniques actives (lidar comme l'expérience CALIPSO lancé au printemps 2004) ou hétérodynes (avec oscillateur local laser embarqué) pour la mesure de la composition atmosphérique depuis l'espace, mais les instruments correspondants ne sont pas encore spatialisables de façon fiable et économique.

I.4 L'expérience IASI-ballon et l'instrument IASI

L'expérience « Infrared Atmospheric Sounding Interferometer » (IASI) développée par le Centre National d'Etudes Spatiales (CNES) utilise un spectromètre de Fourier embarqué sur satellite ayant pour but d'opérer comme un sondeur météorologique en visée au nadir pour effectuer des mesures de l'atmosphère terrestre en émission dans l'infrarouge. Le Laboratoire de Physique Moléculaire et Applications (LPMA) qui est impliqué dans le programme scientifique de IASI a développé un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier en visée au nadir embarqué sous ballon stratosphérique IASI-ballon. L'un des objectifs de IASI-ballon est de préparer la mission spatiale de IASI en effectuant l'acquisition de spectres infrarouges de la basse atmosphère avec la même géométrie de visée que l'instrument IASI embarqué sur la plate-forme satellitaire MetOp (satellite de météorologie opérationnelle développé par l'agence Eumetsat).

I.4.1 Configuration instrumentale de IASI-ballon

L'instrument LPMA/IASI-Ballon (*Fig.I.10 et I.11*) est un spectro-radiomètre à transformée de Fourier destiné au sondage passif à distance des constituants minoritaires de la basse atmosphère, en particulier la troposphère et la basse stratosphère. L'un des objectifs de cette expérience est de préparer la mission spatiale IASI et d'effectuer sa validation ensuite. L'instrument mesure l'émission atmosphérique et fournit des spectres radiométriquement calibrés de l'atmosphère avec une résolution spectrale de $0,06 \text{ cm}^{-1}$ non apodisé², dans le domaine de l'infrarouge thermique. Pour cela, le spectromètre utilise deux corps noirs de référence à différentes températures [TE02], situés dans bloc optique. Ce bloc optique est aussi composé d'un miroir d'acquisition associé à un moteur et à un codeur.

Le miroir d'acquisition permet de pointer une zone précise de la scène atmosphérique par visée au nadir (ou au limbe). L'optique de sortie comporte deux détecteurs infrarouges permettant ainsi de couvrir un large domaine spectral de 600 à 3000 cm^{-1} . Une séquence de mesures (enregistrement de trois interférogrammes : corps noir chaud (CNC), corps noir froid (CNF) et scène atmosphérique) dure entre une et deux minutes. A l'aide d'une procédure de calibration radiométrique [TE02] et des interférogrammes des deux corps noirs de référence,

² Par définition la résolution des spectres non apodisé est la largeur à mi-hauteur de la fonction sinc correspondant à la différence de marche maximale δ_{\max} utilisée soit $\frac{1,207}{2\delta_{\max}}$. La résolution apodisée est conventionnellement définie comme $1/\delta_{\max}$.

on détermine les contributions instrumentales puis ensuite le spectre calibré pour la scène atmosphérique visée

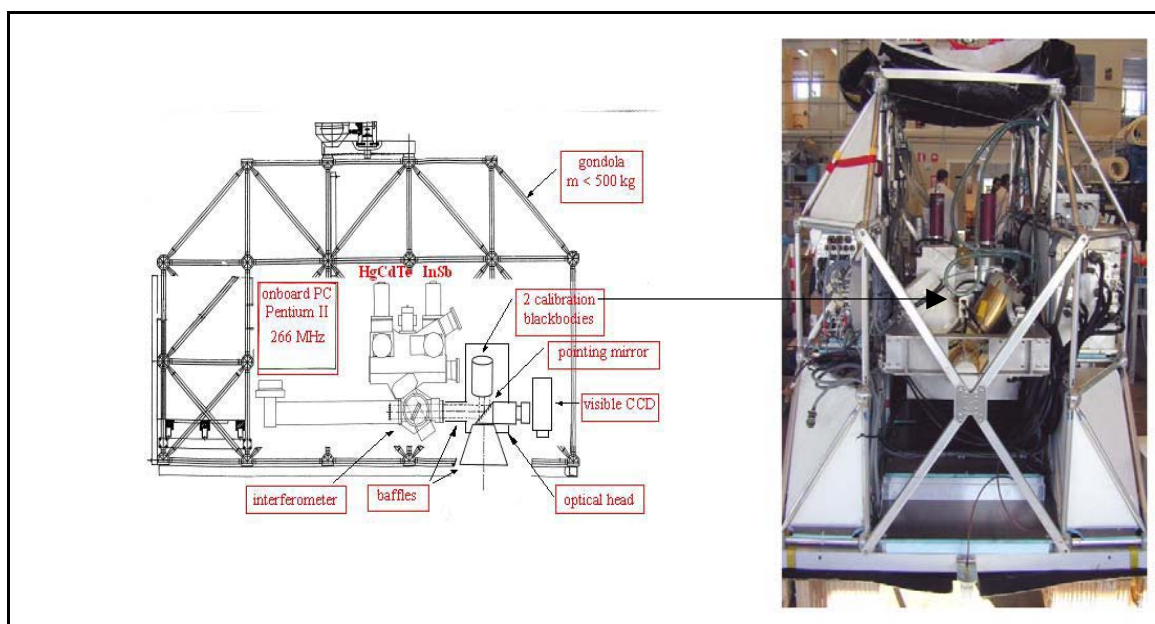


Figure I.10 et I.11 : Nacelle LPMA/IASI-ballon.

Lors du premier vol, l'expérience IASI-ballon était équipée d'une caméra CCD dans le domaine du visible, ce qui permet de voir en direct depuis le centre de contrôle les scènes survolées. Pour le deuxième vol IASI02 une caméra CCD dans le domaine de l'infrarouge thermique a été ajoutée à l'expérience. On peut ainsi effectuer des vols de jour comme de nuit. Les images permettent avec le système d'asservissement à distance du miroir d'acquisition, de contrôler les scènes visées (s'il y a présence de nuages ou de lacs) et d'orienter, si besoin est, le miroir vers la cible voulue de la scène survolée. L'acquisition des interférogrammes se fait à l'aide de deux détecteurs, un détecteur au cadmium mercure tellure (HgCdTe ou MCT) couvrant la région de 600 à 2000 cm^{-1} et un détecteur à l'antimoniure d'indium (InSb) couvrant la région $1900 - 3000\text{ cm}^{-1}$.

Le détecteur MCT est un détecteur photoconducteur. Sa détectivité (D^*) est de $3.10^{10}\text{ cm.Hz}^{1/2}/\text{W}$. Ce détecteur doit être refroidi à l'azote liquide. Le cryostat permet une autonomie supérieure à dix heures. La surface sensible est carrée et a pour coté 1 mm .

Le détecteur InSb est un détecteur photovoltaïque. Sa détectivité (D^*) est de $2.10^{11}\text{ cm.Hz}^{1/2}/\text{W}$ et sa surface sensible est également de 1 mm^2 . Son cryostat est identique à celui du détecteur MCT. On retrouve le résumé des principales caractéristiques techniques de IASI-ballon dans le tableau I.3.

LPMA/IASI-ballon	Caractéristiques	commentaires
Interféromètre à transformée de Fourier Diamètre d'entrée Angle solide	Bomen DA2.01 $\Phi=50$ mm $2,08 \cdot 10^{-4}$ sr	Miroir plan
Déplacement maximum du miroir (MPD) OPD utilisée (optical path difference) en émission thermique	$\Delta x=25$ cm $\delta_{\max}^{BB} = 1$ cm $\delta_{\max}^{nadir} = 10$ cm	Déplacement maximal (interférogramme unilatère pour l'instrument du LPMA) OPD pour les vues CNF et CNC OPD des scènes atmosphériques
Deux détecteurs infrarouges Détecteur HgCdTe (MCT) Détecteur InSb	HgCdTe et InSb $D^*=3 \cdot 10^{10}$ cm Hz ^{1/2} /W $D^*=2 \cdot 10^{11}$ cm Hz ^{1/2} /W	600-3000 cm ⁻¹ (recouvrement dans la région 1800-2000 cm ⁻¹) à 830 cm ⁻¹ à 2000 cm ⁻¹
Résolution spectrale maximum Résolution spectrale du CNF et CNC Résolution spectrale de la scène	$\Delta \tilde{\nu} = 0,02$ cm ⁻¹ $\Delta \tilde{\nu} = 1$ cm ⁻¹ $\Delta \tilde{\nu} = 0,1$ cm ⁻¹	Résolution spectrale apodisée en absorption Résolution spectrale apodisée en émission Résolution spectrale apodisée en émission
PC embarqué	Pentium II à 266 MHz	64 Mbytes (RAM)
Acquisition du miroir Moteur et encodeur CNC CNF	45° (incidence) $\pm 0,1^\circ$ de T _{ambiante} à 50°C de T _{ambiante} à -30°C	Miroir plan Chauffé par une résistance Refroidi par effet Peltier
Téléométrie	500 kbits/s	
Télécommande	9600 bits/s	

Tableau I.3 : Caractéristiques de IASI-ballon.

I.4.2 Configuration d'un vol IASI-Ballon

A ce jour IASI-Ballon a déjà effectué deux vols, à partir de la base d'Esrang près de Kiruna dans le nord de la Suède. Le premier vol a eu lieu en mars 2001 et le second en août 2002. L'instrument IASI-ballon est embarqué sous ballon stratosphérique pouvant atteindre un plafond de vol de 40 km avec une charge utile de la nacelle de 500 kg maximum. La nacelle fait partie d'une chaîne de vol (*Fig. I.12*), que l'on peut diviser en quatre parties :

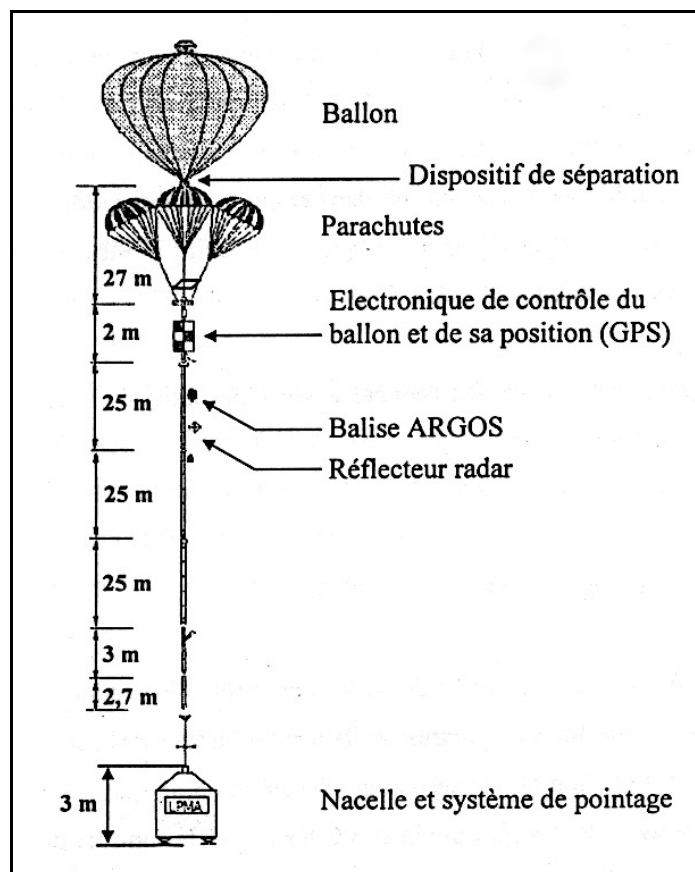


Figure I.12 : Chaîne de vol de l'instrument LPMA/IASI ballon [\[TE01\]](#).

- Le ballon porteur, un BSO (Ballon Stratosphérique Ouvert), gonflé à l'hélium et dont le volume dépend de l'altitude à atteindre par l'expérience.
- Un ensemble de trois parachutes qui permet, après séparation du ballon, une descente de la nacelle jusqu'au sol. La séparation du ballon porteur conduisant au déploiement des parachutes est radiocommandée à partir de la base au sol.
- Des systèmes de navigation permettant de contrôler le ballon et de connaître sa position en altitude, latitude et longitude. Pour la récupération au sol une balise ARGOS facilite la localisation de la charge utile après l'atterrissage. La présence d'un réflecteur radar permet un suivi par le contrôle aérien.
- Enfin, à l'extrémité inférieure de la chaîne de vol, se trouve la nacelle et son système de pointage permettant de stabiliser l'expérience embarquée [\[WILD91\]](#) pour limiter les mouvements de la nacelle et conserver un azimut relativement constant.

Lors d'un vol IASI-ballon la montée se fait relativement rapidement jusqu'au plafond (1h30 pour monter à 31 km d'altitude lors du vol IASI01 *Fig. I.13*). C'est pendant la fin de la phase de montée et au plafond qu'on effectue l'acquisition et l'enregistrement des

interférogrammes, évitant ainsi le dépôt de vapeur d'eau sur les miroirs en dessous ou au voisinage de la tropopause. Le PC à bord permet la sauvegarde des spectres enregistrés. Il contrôle l'interféromètre et le miroir de pointage du bloc optique permettant d'intervenir si besoin sur certains réglages (gain et résolution) à partir de l'équipement de télémétrie et de télécommande effectuant la liaison avec la station au sol. Durant le vol on peut effectuer le largage d'une drop-sonde qui permet d'obtenir des mesures complémentaires (profil de température, profil d'humidité,...) qui serviront de référence lors du dépouillement des spectres. On peut également réaliser un sondage ozone depuis le site de lancement.

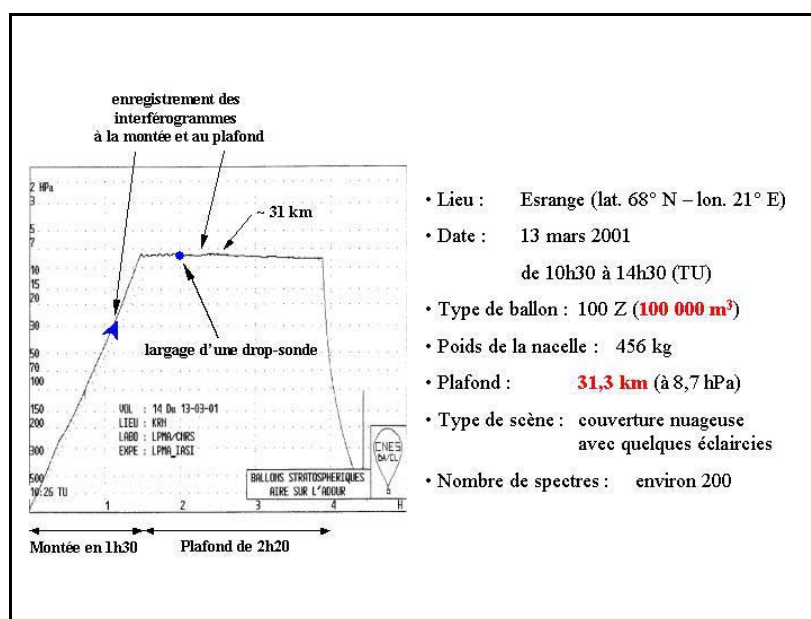


Figure I.13 : Configuration du vol IASI01 le 13 mars 2001.

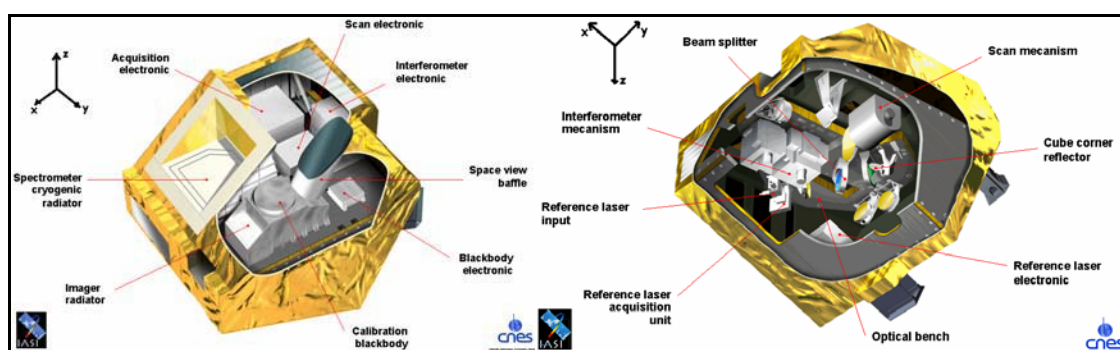
En fin de vol un système pyrotechnique, télécommandé à partir du sol par le centre des opérations du CNES, active la séparation du ballon. La nacelle entame alors sa descente avec l'ouverture des parachutes. Il reste ensuite à récupérer la nacelle. Grâce au GPS et à la balise ARGOS la localisation et la récupération peuvent en général s'effectuer dans de bonnes conditions.

I.4.3 L'expérience IASI embarquée sur la plate-forme satellitaire MetOp

L'instrument IASI (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer) est un instrument développé par le CNES pour EUMETSAT (European organization for exploitation of METeorological SATellites) [SIM97]. Il fait partie des instruments embarqués sur la plate-forme satellitaire MetOp (Fig. I.16) développée par l'Agence Spatiale Européenne (ESA). Les instruments seront opérés par EUMETSAT qui traitera et distribuera les données

aux centres européen (ECMWF) ou nationaux (Météo France, UKMO) de météorologie opérationnelle. Les performances et la calibration de IASI seront suivies au Centre d'Expertise Technique du CNES à Toulouse. Le projet IASI qui a démarré en 1995, s'inscrit dans un ensemble de trois satellites scientifiques, dont les lancements sont prévus pour les années 2005, 2010 et 2015. Le principal objectif de IASI, est de permettre une étude à l'échelle globale de la troposphère et de la basse stratosphère à partir d'une orbite héliosynchrone à une altitude de 836 km (MetOp sera le premier satellite européen météorologique défilant). IASI devrait fournir des profils de température et d'humidité très précis en vue d'améliorer les prévisions météorologiques. Il devrait aussi permettre la restitution des composants chimiques intervenant dans l'effet de serre ou responsables de la pollution atmosphérique.

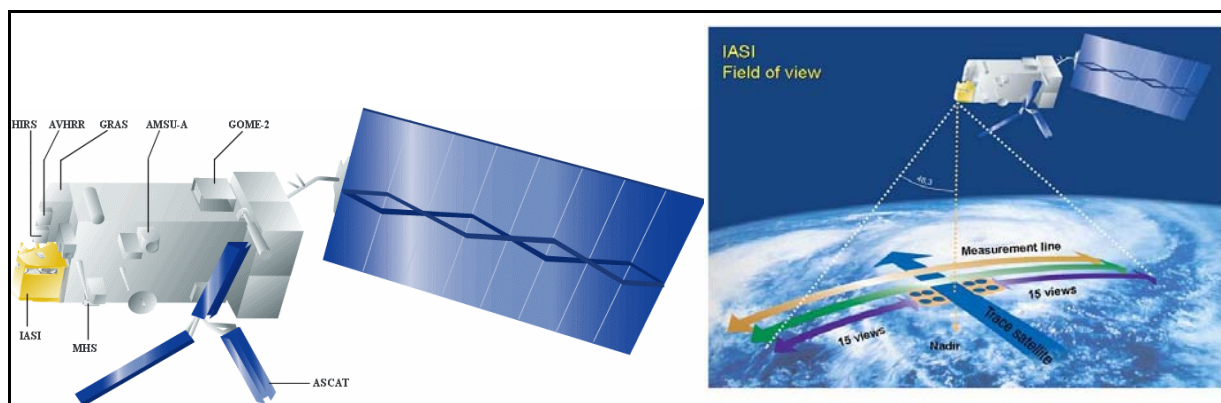
La durée de vie de IASI/MetOp est fixée à cinq ans que l'on peut découper en trois phases : la phase de validation de l'instrument en orbite d'une période de six mois environ, la phase pré-opérationnelle où l'on évalue les performances de l'instrument et enfin la phase opérationnelle jusqu'à la fin de vie du satellite. Tout comme IASI-ballon, l'instrument spatial IASI est un spectromètre à transformée de Fourier travaillant dans le domaine de l'infrarouge et mesurant directement l'émission des molécules atmosphériques. Il est nécessaire de calibrer l'instrument à partir de deux sources connues : un corps noir chaud embarqué dans le satellite MetOp (*Fig. I.14, I.15*) (CNC à 293 K) et l'espace froid (deep space, DS, à 2,7 K) pour en déduire la réponse de l'instrument.



Figures I.14 et I.15 : Instrument IASI avec à gauche le système permettant la calibration de l'instrument et sur le schéma de droite le système optique. (source CNES : <http://smc.cnes.fr/IASI/>)

Une séquence complète de visée (CNC, DS, acquisition de 30 scènes) dure 8 secondes. Le satellite est placé en orbite polaire, permettant ainsi une couverture journalière de 95,5% de la surface terrestre. Le champ de vue de l'instrument est constitué de quatre pixels circulaires hors axe de 0,8 degré de diamètre angulaire, ce qui correspond à 12 km pour une scène au nadir sur la Terre (*Fig. I.17*). Ces quatre pixels sont inscrits dans un carré de 50 km par 50 km en

projection au sol ou angulairement de $3,33^\circ$ par $3,33^\circ$. Chacun des pixels est imagé sur les trois détecteurs différents (trois bandes spectrales couvrant l'intervalle global $645\text{--}2760\text{ cm}^{-1}$). L'acquisition des visées se fait de manière symétrique par rapport au nadir avec un angle variant de $-48,2^\circ$ à $+48,2^\circ$.



Figures I.16 et I.17 : IASI ainsi que d'autres instruments sur la plate-forme satellitaire MetOp et le champ de vue en orbite polaire héliosynchrone à 836 km d'altitude de l'instrument IASI. (source CNES : <http://smc.cnes.fr/IASI>)

Le domaine spectral que couvre l'instrument IASI est divisé en trois bandes, avec un détecteur spécifique pour chacune de ces bandes. La résolution spectrale et la précision radiométrique attendue, exprimée en différence de température équivalente au bruit (NEDT), sont données pour l'instrument IASI dans le tableau I.4 ainsi que le type de détecteur utilisé pour chaque bande spectrale. L'expression du bruit radiométrique en terme de radiance est donnée par la fonction du rayonnement du corps noir :

$$L_{\tilde{\nu}} = \frac{2hc^2\tilde{\nu}^3}{\exp\left(\frac{hc\tilde{\nu}}{kT}\right) - 1} \quad (1.22)$$

où h est la constante de Planck ($6,6260755 \cdot 10^{-34}$ J.s)

c la vitesse de la lumière dans le vide ($299\,792\,458\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)

k la constante de Boltzmann ($1,380658 \cdot 10^{-23}$ J.K $^{-1}$)

$\tilde{\nu}$ représente le nombre d'onde (en cm^{-1})

et T la température (en K)

L'incertitude en radiance en fonction d'une variation de température de brillance est donc :

$$\Delta L_{\tilde{\nu}}(T) = L_{\tilde{\nu}}(T) \left(\frac{hc\tilde{\nu}}{kT^2} \right) \left(\frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{hc\tilde{\nu}}{kT}\right)} \right) \Delta T \quad (1.23)$$

Le bruit théorique en fonction du nombre d'onde en température de brillance et en radiance pour l'instrument IASI est représenté dans les figures I.18 et I.19.

Bande	Intervalle spectral	Résolution	NEDT à 280 K	Nature du détecteur
1	645 - 1210 cm ⁻¹ (8,26 – 15,5 μm)	0,35 cm ⁻¹	< 0,2 K	HgCdTe Photoconducteur
2	1210 – 2000 cm ⁻¹ (5 – 8,26 μm)	0,45 cm ⁻¹	< 0,3 K	HgCdTe Photovoltaïque
3	2000 – 2760 cm ⁻¹ (3,62 – 5 μm)	0,55 cm ⁻¹	< 0,35 K	InSb Photovoltaïque

Tableau I.4: Caractéristiques et bandes spectrales de l'instrument IASI.

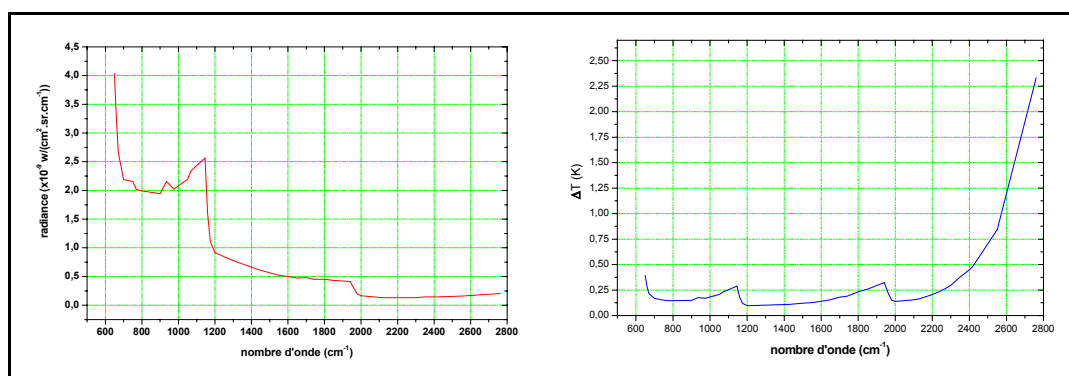


Figure I.18 et I.19 : Bruit radiométrique attendu pour l'instrument IASI à 280 K, en radiance à gauche et en température de brillance à droite.

En parallèle à la préparation de l'instrument, le groupe ISSWG (IASI Sounding Science Working Group) est un ensemble d'une vingtaine d'équipes de chercheurs et d'ingénieurs qui ont répondu à un appel d'offre CNES-EUMETSAT. Leur rôle est de préparer la mission IASI et d'établir les capacités futures de l'instrument ainsi que les produits et, si besoin est, de faire des recommandations visant à améliorer les algorithmes de traitement des données de l'instrument. Dans une seconde phase l'ISSWG jouera un rôle dans la validation de l'instrument. Dans le tableau I.5 on peut trouver la liste des « produits » que l'instrument IASI/MetOp pourra fournir seul ou de manière couplée avec les autres instruments embarqués sur la plate-forme MetOp.

Variable géophysique	Précision attendue	Résolution verticale	Echantillonnage horizontal
Profil de température	1 K (conditions de ciel clair)	1 km	25 km (ciel clair)
Profil d'humidité	10% (conditions de ciel clair)	(troposphère, ciel clair)	25 km (ciel clair)
Colonne totale d'ozone	> 5% par pixel non-nuageux	N/A	25 km (ciel clair)
Distribution verticale d'ozone	20%	0 – 6 km	25 km
	9%	0 – 16 km	
	8% par pixel clair		
Colonne totale de CO	10% / pixel	N/A	25 km
Colonne totale de CH ₄	5 – 10 % / pixel	N/A	25 km
Colonne Totale de N ₂ O	5 – 10 % / pixel	N/A	100 km
CO ₂	2 %	N/A	
SO ₂			
CFC12	10 %	N/A	100 km
CFC11, HCFC22	20 %	N/A	100 km
Couverture nuageuse	5 à 10%		
Température au sommet des nuages	1 à 2 K (nuages épais)		
Altitude au sommet des nuages ou pression	200 – 300 m		
	50 – 100 m		
	50 m (couverture 100%)		
Epaisseur optique des aérosols	?	?	?
Température de surface			
	mer	< 0,5 K (ciel clair)	25 km
terre	1 K (ciel clair)		25 km
Emissivité de surface continentale	0,5 % (canaux de type de fenêtre atmosphérique) 1% (canaux pour les espèces chimiques)		25 km

Tableau I.5 : Produits déduits des mesures de l'instrument IASI/MetOp ou combiné avec les autres instruments embarqués sur MetOp (AVHRR, AMSU, MHS) (source CNES : <http://smsc.cnes.fr/IASI/>).

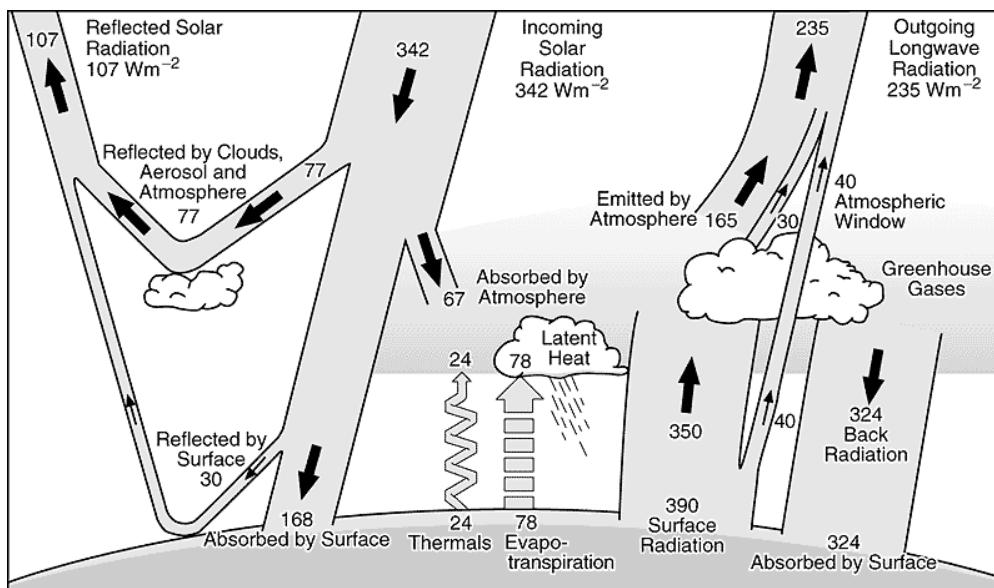
1.5 Conclusion

Dans cette première partie, nous avons pu donner un aperçu des phénomènes atmosphériques pour la planète Terre. A travers son évolution temporelle naturelle, sur des

millions d'années ou sous l'influence anthropique sur des échelles de temps beaucoup plus courtes, la composition chimique, la température et la dynamique ont pu varier. Les variations spatiales de la composition chimique de la troposphère et de la stratosphère en fonction de l'altitude ou de la latitude résultent clairement de grand nombre de facteurs dynamiques, chimiques, radiatifs ou même bio-géochimiques.

Nos connaissances sur l'évolution de l'atmosphère sont récentes, moins de deux siècles, et les modèles climatiques n'arrivent pas encore parfaitement à extrapoler et à prévoir l'évolution à l'échelle globale. Ainsi, on sait que la tendance est à la hausse de la température globale de la Terre mais, on l'estime avec un accroissement compris entre 0,5 à 7°C. Les conséquences sont radicalement différentes. La raison de cette si grande différence est due à une prise en compte d'un nombre important de paramètres qui ne sont pas forcément quantifiables précisément, comme les évolutions socio-économiques des pays industriels ou en voie de développement ou l'impact direct de la prise de conscience des problèmes environnementaux par les citoyens et les gouvernements. D'un autre côté, des progrès sont faits pour améliorer notre compréhension de l'atmosphère et de la climatologie. Ainsi la combinaison des mesures au sol, en avion en ballon ou à partir des satellites météorologiques permet l'étude à la fois globale et avec une bonne précision des phénomènes étudiés. Ces nouveaux outils apportent une meilleure compréhension des phénomènes physico-chimiques comme la variabilité spatiale et temporelle des espèces chimiques. IASI-ballon et par la suite IASI/MetOp sont des expériences scientifiques qui visent à contribuer à progresser dans ces domaines.

Bilan radiatif de la Terre (source IPCC TAR Chap. 1.2.1)



CHAPITRE II

Transfert radiatif et inversion des spectres au nadir en émission thermique

Le spectre d'énergie des photons qui composent le rayonnement solaire et son interaction avec les constituants de l'atmosphère déterminent ce qu'on appelle le bilan radiatif de la Terre. La température de la basse atmosphère résulte principalement de la capacité de notre planète à conserver une quantité significative de l'énergie incidente du Soleil. Les terres émergées et les océans absorbent une grande part de cette énergie et la ré-émettent sous forme de chaleur. L'atmosphère pour sa part absorbe aussi une partie de ce rayonnement incident ainsi que le rayonnement ré-émis par la surface. A cela il faut retrancher l'émission propre de l'atmosphère qui est fonction des espèces chimiques, ainsi que de leur rapport de mélange et de

la température, mettant en jeux des signatures spectrales spécifiques de l'espèce moléculaire considérée.

Dans cette partie nous montrerons comment modéliser ces phénomènes d'absorption et d'émission à travers l'équation du transfert radiatif dans l'atmosphère. Cette modélisation nous permettra de simuler les spectres d'émission dans l'infrarouge. Grâce aux calculs des spectres simulés et à une méthode d'inversion, il nous sera alors possible à partir de spectres observés, de remonter aux conditions physiques sous-jacentes (températures, concentrations,...) à partir de l'information contenue dans les signatures du spectre observé.

II.1 Interaction rayonnement - matière

II.1.1 Spectroscopie moléculaire atmosphérique

Nous n'aborderons ici que succinctement et de manière générale la structure du spectre de l'atmosphère terrestre en relation avec les propriétés des molécules responsables de l'émission ou de l'absorption du rayonnement électromagnétique.

La variable spectrale utilisée en spectroscopie est le nombre d'onde $\tilde{\nu}$ exprimé en cm^{-1} . Cette variable est reliée à la longueur d'onde et à la fréquence par les relations suivantes (2.1) où c est la vitesse de la lumière dans le vide. La figure II.1 donne une échelle des énergies et les grands domaines spectroscopiques correspondant.

$$\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1}) = \frac{10^4}{\lambda(\mu\text{m})} = \frac{10^{-2}}{c(\text{m.s}^{-1})} \nu(\text{Hz}) \quad (2.1)$$

Rayons γ	RX		UV		Visible		IR			Ondes mm		Microondes	Ondes radio
	durs	mous	Vide	proche	proche	proche	moyen	lointain	sub	radar			
$\leftarrow <$	0.1 Å	5 Å	10 nm	200 nm	400 nm	700 nm	2.5 μm	25 μm	1 mm				10 cm $\rightarrow \lambda$
	$> 10^9$	2×10^7	10^6	5×10^4	2.5×10^4	1.4×10^4	4000	400	10				0.1 $\rightarrow \tilde{\nu} / \text{cm}^{-1}$
	3×10^{13}	6×10^{12}	3×10^{10}	1.5×10^9	7.5×10^8	4×10^8	1.2×10^8	1.2×10^7	3×10^5				3000 $\rightarrow \nu / \text{MHz}$
	1.2×10^5	2400	120	6	3	1.7	0.5	0.05	0.001				$10^5 \rightarrow \epsilon / \text{eV}$
	1.2×10^7	2.4×10^5	1.2×10^4	600	300	170	48	5	0.12				$1.2 \times 10^{-3} \rightarrow E / \text{kJ.mol}^{-1}$

Figure II.1 : Echelle des énergies du rayonnement électromagnétique correspondant aux différents domaines du spectre.

Le Soleil étant la source essentielle du rayonnement électromagnétique arrivant dans notre atmosphère, les photons qui nous parviennent sont principalement dans le domaine de l'infrarouge, le visible et une partie de l'ultraviolet. Le domaine couvert par ces énergies correspond pour les molécules (*Tabl. II.1*) à des transitions entre états électroniques faisant intervenir des électrons de valence pour certaines molécules et entre niveaux de vibration-rotation pour la majorité des molécules atmosphériques.

Origine moléculaire	Electrons de cœur	Electrons de valence	Vibration moléculaire	Rotation moléculaire	Translation et Aimantation nucléaire
Energie en λ (m)	$< 10^{-8}$	$10^{-8} - 10^{-5}$	$10^{-5} - 10^{-4}$	$10^{-4} - 1$	1-100
Nature	Rayons X et γ	Visible-UV	Infrarouge	micro-ondes	Ondes Hertziennes

Tableau II.1 : Correspondances entre énergies absorbées par une molécule et phénomène moléculaire

Dans notre travail lié à la préparation de la mission IASI, instrument qui couvre le domaine de l'infrarouge thermique i.e. $645-2760 \text{ cm}^{-1}$ ou $15,5 - 3,6 \text{ }\mu\text{m}$, nous avons été amenés à ne retenir que les phénomènes correspondant aux variations de l'énergie de vibration et de rotation des molécules. Ce choix de l'infrarouge moyen permet la mesure d'un grand nombre de constituants atmosphériques (*Fig. II.2*). Il exclut malgré tout des domaines spectraux où d'autres espèces peuvent être mesurées dans de meilleures conditions : par exemple le domaine micro-onde pour ClO ou le domaine visible-UV pour NO₂. Mais dans les 2 cas certaines transitions de ces espèces sont également détectables dans l'infrarouge.

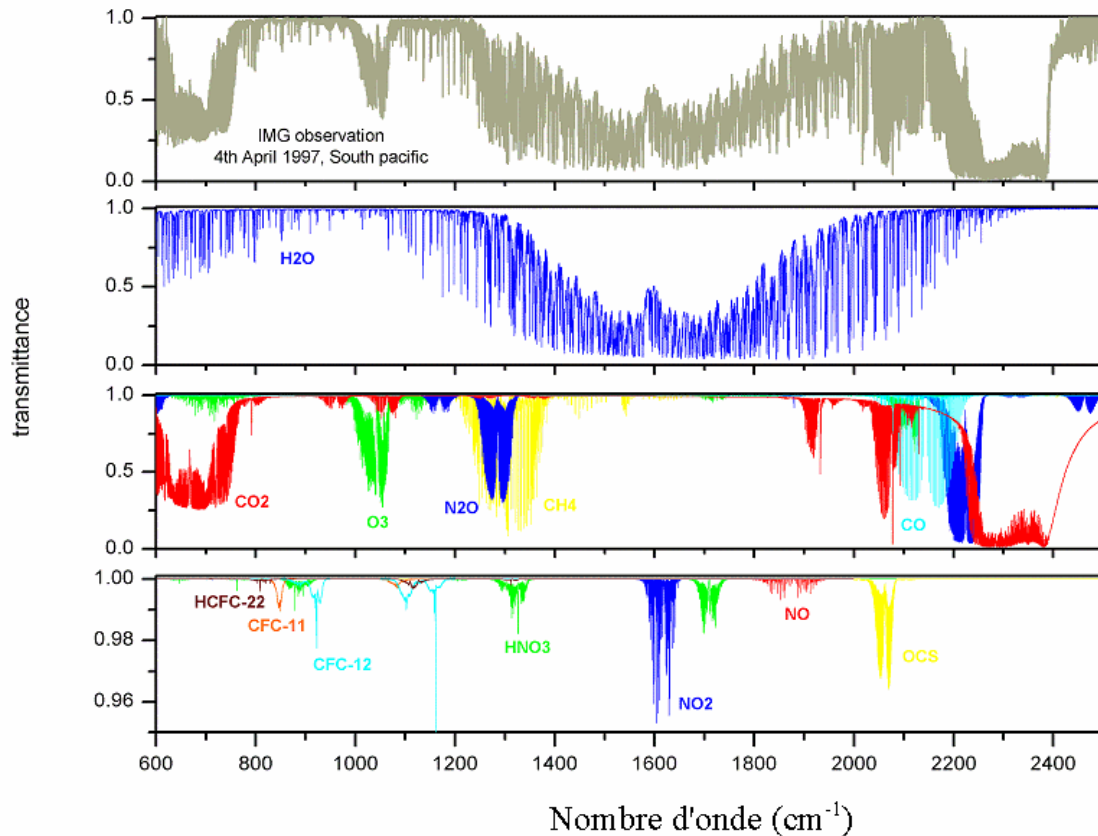


Figure II.2 : Spectre atmosphérique en émission dans l'infrarouge thermique réalisé par l'instrument IMG (en gris) le 4 avril 1997 dans le pacifique sud. En dessous on voit les différentes contributions spectrales calculées des différentes espèces chimiques [CLE03], [TUR04], [TUR02].

II.1.2 Spectroscopie de vibration-rotation

Le processus d'absorption ou d'émission d'un photon d'énergie $\Delta E_{transition} = h\nu$ par une molécule correspond à une transition d'un niveau à un autre. La longueur d'onde du rayonnement mis en jeu diffère suivant la nature de la transition. Pour le domaine qui nous intéresse (l'infrarouge) on pourra ne considérer que le domaine des transitions rotationnelles et des transitions vibrationnelles.

La modélisation du transfert radiatif doit passer par une bonne compréhension de tous les phénomènes d'échange d'énergie comme l'absorption et l'émission. Les raies de vibration-rotation sont caractéristiques de chaque espèce. Un spectre dans l'infrarouge porte donc la signature caractéristique de chaque espèce pouvant contribuer à un domaine spécifique de longueur d'onde. Il résulte de la contribution des transitions vibro-rotationnelles de chaque molécule et on parle pour le calcul de spectre raie par raie.

Pour le non spécialiste de spectroscopie moléculaire nous rappelons dans l'annexe A.1 quelques-unes des notions ou notations qui sont utilisées dans la suite du manuscrit (bande ν_k , branche Q, ...) concernant les molécules intéressantes pour la partie infrarouge du spectre atmosphérique.

II.2 Modèle du transfert radiatif

II.2.1 Équation du transfert radiatif

L'émission propre de l'atmosphère est très faible devant celle du soleil. Les spectres obtenus en absorption et en utilisant le soleil comme source donnent un signal sur bruit très élevé, tandis que la visée au nadir en émission offre des spectres beaucoup moins intenses et donc plus bruités. Pour reproduire le spectre en émission à partir d'une ligne de visée verticale vers le bas, il faut effectuer un calcul du transfert radiatif entre l'altitude de la scène visée et l'altitude où on effectue la mesure. Dans le cas d'un vol IASI-ballon c'est l'altitude entre la nacelle du ballon et l'altitude au niveau du sol. L'altitude de la scène visée n'est pas toujours facile à déterminer. En effet en présence de nuages semi-transparent, il est difficile de savoir si la radiance de surface observée est bien celle du sol ou si elle est la somme d'une partie de réflexion solaire sur le nuage et de la radiance du sol. Dans la suite, pour établir l'équation du transfert radiatif, on considère que la radiance de surface est celle d'une scène claire, et donc que l'on vise soit une surface terrestre, soit une surface d'eau.

On se place dans un milieu à l'équilibre thermodynamique local (LTE), cette hypothèse est tout à fait valable dans la troposphère et la basse stratosphère. A partir de la loi de Beer-Lambert et la loi de Kirchoff on peut écrire l'équation du transfert radiatif. La luminance spectrale énergétique ou radiance³ spectrale dans une colonne de gaz le long d'une ligne de visée au nadir à une altitude s (Fig. II.3) pour une source monochromatique a pour forme :

³ Le terme « radiance » est très utilisé dans la littérature scientifique par les spécialistes du sondage à distance par technique infrarouge passive, pour une quantité physique exprimée en $W/(cm^2 sr cm^{-1})$ lorsque la variable spectrale est le nombre d'onde exprimé en cm^{-1} . En toute rigueur, le terme qui devrait être utilisé en français serait « luminance énergétique ». Nous avons préféré conserver le terme "radiance" qui correspond toujours à la « luminance spectrale énergétique » (à haute résolution), lorsque la variable spectrale est le nombre d'onde ou la longueur d'onde.

$$L_{\tilde{\nu}}(s) = L_{\tilde{\nu}}(0)T_{\tilde{\nu}}(0,s) + \int_0^s J_{\tilde{\nu}}(s')T_{\tilde{\nu}}(s,s')\alpha_{\tilde{\nu}}(s')ds' + (1 - \varepsilon_{\tilde{\nu}}) \left[\int_{+\infty}^0 J_{\tilde{\nu}}(s')T_{\tilde{\nu}}(s,s')\alpha_{\tilde{\nu}}(s')ds' \right] T_{\tilde{\nu}}(0,s) \quad (2.2)$$

où:

$L_{\tilde{\nu}}(s)$ est la radiance à la sortie de la colonne de gaz, exprimée en $W/(cm^2 sr cm^{-1})$.

$L_{\tilde{\nu}}(0)$ est la radiance à l'entrée de la colonne de gaz, exprimée en $W/(cm^2 sr cm^{-1})$.

$T_{\tilde{\nu}}(0,s)$ est la transmission de la colonne de gaz (émission du fond terre, nuage, eau).

$\alpha_{\tilde{\nu}}(s')$ est le coefficient d'absorption exprimé en $1/cm^{-1}$.

$J_{\tilde{\nu}}(s')$ est la fonction source au point d'abscisse curviligne s' , exprimée en $W/(cm^2 srcm^{-1})$

$T_{\tilde{\nu}}(s,s')$ est la transmission entre l'abscisse s' et le ballon située à l'abscisse s .

L'équation (2.2) est une forme simplifiée de l'équation du transfert radiatif en émission qui néglige notamment les contributions du flux descendant réfléchi provenant de toutes les directions.

Le premier terme de l'expression (2.2) représente l'émission de la surface lors de la visée au nadir. Dans le cas d'un spectre atmosphérique, la radiance d'entrée est la radiance qu'émet la scène visée. Pour une scène claire au nadir (sans nuages) $L_{\tilde{\nu}}(0)$ est la radiance à la surface terrestre ou à la surface de la mer qu'on peut souvent assimiler à celle d'un corps noir ou d'un corps gris suivant la loi de Planck :

$$L_{\tilde{\nu}}(0) = \varepsilon_{\tilde{\nu}} B_{\tilde{\nu}}(T_{surf}) \quad (2.3)$$

Dans cette équation : $\varepsilon_{\tilde{\nu}}$ est l'émissivité caractéristique de la surface qui émet et qui peut dépendre du nombre d'onde. L'émissivité spectrale $\varepsilon_{\tilde{\nu}}$ d'un corps gris (ou réel) est donnée par la relation :

$$\varepsilon_{\tilde{\nu}} = \frac{L_{corps}(\tilde{\nu}, T)}{L_{CN}(\tilde{\nu}, T)} \quad (\text{par définition}) \quad (2.4)$$

avec :

- T la température du corps étudié (K)
- $L_{corps}(\tilde{\nu}, T)$ la radiance du corps étudié en $W/(cm^2 srcm^{-1})$
- $L_{corps}(\tilde{\nu}, T)$ la fonction de Planck cf. (2.5) en $W/(cm^2 srcm^{-1})$

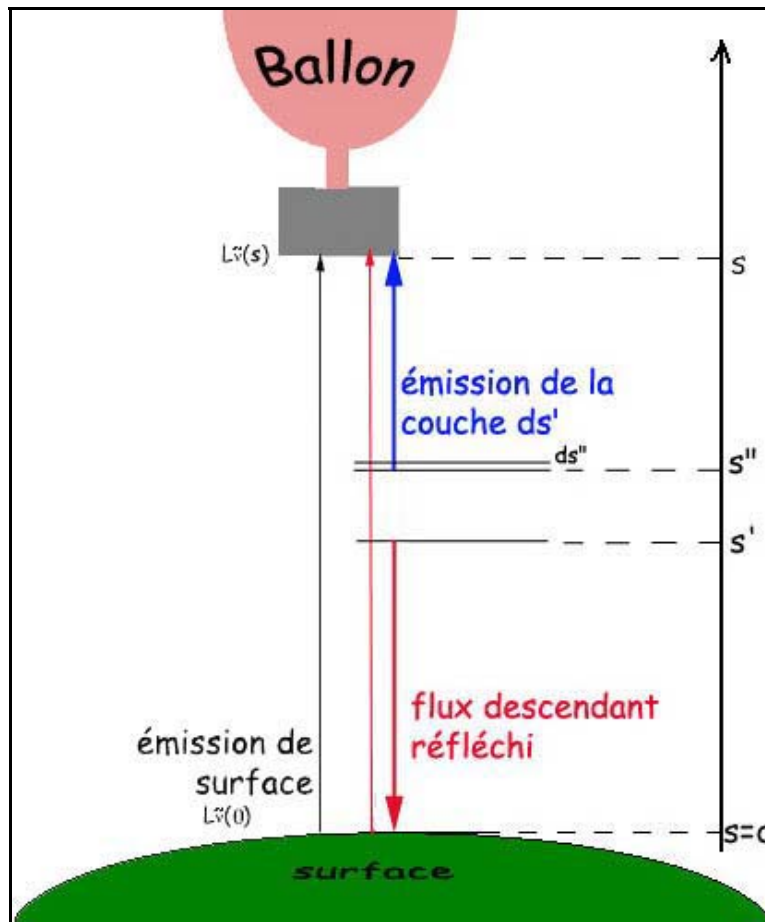


Figure II.3 : Géométrie le long du parcours optique pour l'équation du transfert radiatif pour un sondage en visée au nadir.

$B_{\tilde{\nu}}(T_{surf})$ est la radiance de surface suivant la loi du corps noir à la température T_{surf} , c'est-à-dire :

$$B_{\tilde{\nu}}(T_{surf}) = \frac{2hc^2\tilde{\nu}^3}{\exp\left(\frac{hc\tilde{\nu}}{kT_{surf}}\right) - 1} \quad (2.5)$$

Le second terme de (2.2) est la somme des contributions radiatives des différentes couches d'épaisseur ds' le long de la ligne de visée. La première intégrale représente l'émission énergétique de l'atmosphère. Enfin le troisième terme correspond au flux descendant réfléchi. Une partie du rayonnement émis par toute l'atmosphère est dirigé en direction de la surface et va pour une part $(1 - \varepsilon_{\tilde{\nu}})$ être réfléchi par celle-ci. On doit donc en tenir compte dans la radiance au point d'abscisse curviligne s .

On peut reprendre l'expression intégrale se trouvant dans (2.2) et faire apparaître la différentielle de la transmission optique $T_{\tilde{\nu}}(s, s')$ entre s et s' :

$$T_{\tilde{\nu}}(s, s') = \exp\left(-\int_s^{s'} \alpha_{\tilde{\nu}}(s'') ds''\right) = \exp(-\tau_{\tilde{\nu}}(s, s')) \quad (2.6)$$

On définit la transmission comme étant l'exponentielle de moins l'épaisseur optique $\tau_{\tilde{\nu}}$. L'épaisseur optique étant elle-même définie comme l'intégrale sur un élément ds'' de

$$\text{l'absorption : } \tau_{\tilde{\nu}}(s, s') = \int_s^{s'} \alpha_{\tilde{\nu}}(s'') ds''$$

En combinant (2.2) et (2.6) on peut réécrire la radiance à la sortie :

$$L_{\tilde{\nu}}(s) = L_{\tilde{\nu}}(0)T_{\tilde{\nu}}(0, s) + \int_0^s J_{\tilde{\nu}}(s') \frac{\partial T_{\tilde{\nu}}(s, s')}{\partial s'} ds' + (1 - \varepsilon_{\tilde{\nu}}) \left[\int_0^s J_{\tilde{\nu}}(s') \frac{\partial T_{\tilde{\nu}}(s, s')}{\partial s'} ds' \right] T_{\tilde{\nu}}(0, s) \quad (2.7)$$

On retrouve ainsi sous une forme plus usuelle (ne considérant pas le terme de flux descendant réfléchi) l'équation du transfert radiatif le long d'une ligne de visée entre l'origine des abscisses curvilignes $s = 0$ et le point courant d'abscisse curviligne s . On peut introduire une autre relation faisant intervenir les sections efficaces $\sigma_{\tilde{\nu}}(s')$ qui ont une importance pour le temps de calcul et dont on reparlera ultérieurement.

$$\tau_{\tilde{\nu}}(s, s') = \int_s^{s'} \alpha_{\tilde{\nu}}(s'') ds'' = \int_s^{s'} \sigma_{\tilde{\nu}}(s'') [X_j(s'')] ds'' \quad (2.8)$$

Où $[X_j(s'')]$ est la densité particulière à l'abscisse curviligne s'' de l'espèce j (en molécule/cm³) pour une seule espèce chimique présente. L'expression (2.8) donne donc la transmission en s et s' pour une espèce chimique j .

En partant de l'équation (2.5) on peut discrétiser le coefficient d'absorption $\alpha_{\tilde{\nu}}$ et faire apparaître les caractéristiques spécifiques des constituants atmosphériques :

$$\alpha_{\tilde{\nu}}(s'') = \sum_{j=1}^{NE} \sum_{i=1}^{NR_j} \sigma_{i,j}(\tilde{\nu}, s'') [X_j(s'')] = \sum_{j=1}^{NE} \left(\sum_{i=1}^{NR_j} S_{i,j}(\tilde{\nu}_0, s'') \phi_{i,j}((\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0), s'') \right) [X_j(s'')] \quad (2.9)$$

avec: NE nombre de molécules présentes dans le milieu.

NR_j nombre de raies d'absorption de la molécule j au voisinage du nombre d'onde $\tilde{\nu}$.

$[X_j(s'')]]$ densité particulaire à l'abscisse curviligne s'' de l'espèce j (en molécule/cm³).

$\sigma_{i,j}$ section efficace d'absorption de la raie i de l'espèce j (cm²/molécule).

$S_{i,j}(\tilde{\nu}_0)$ intensité intégrée de la raie i de l'espèce j (cm⁻¹/(molécule cm⁻²))

$\tilde{\nu}_0$ nombre d'onde central de la raie i de l'espèce j

$\phi_{i,j}(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)$ profil normalisé de la raie i de l'espèce j (1/cm⁻¹) $\left(\int_0^{+\infty} \phi_{i,j}(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0) d\tilde{\nu} = 1 \right)$

Notons que pour déterminer la densité particulaire X_j de l'espèce j dans l'atmosphère, on considère le gaz comme un gaz parfait. On peut donc à partir de la température et de la pression avoir la densité avec :

$$[X_j] = N_0 \frac{P_j T_0}{P_0 T} \quad (2.10)$$

Où N_0 est le nombre de Loschmidt (= 2,686763.10¹⁹ molécule.cm⁻³)

P_0 et T_0 sont respectivement la pression et température standard ($P_0 = 1013,15$ hPa, $T_0 = 273,15$ K)

P_j est la pression partielle pour l'espèce chimique j considérée et T la température du gaz.

Il est important de noter que l'intensité intégrée des raies d'absorption $S_{i,j}(\tilde{\nu}_0, s'')$ dépend seulement de la température alors que leurs profils $\phi_{i,j}(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0, s'')$ dépendent de la température et de la pression dans la colonne de gaz au point d'abscisse curviligne s'' . Même si l'expression de la transmission est complexe, on comprend que, puisque les concentrations interviennent, on puisse en principe par un processus mathématique (décrit sous le terme général de méthode d'inversion, cf. § II.4) remonter de la transmission $T(s,0)$ aux profils de concentration $[X_j(z)]$

Le calcul de la radiance ou de la transmission explicitée ci-dessus est appelé calcul « raie par raie » car on considère successivement la contribution de chaque raie d'absorption de toutes les espèces considérées. La mise en oeuvre de ce type de calcul suppose qu'on dispose de données spectroscopiques adéquates (la référence pour l'atmosphère terrestre étant la banque HITRAN [ROT92], [ROT98] ou GEISA [JAC99]). Dans certain cas, on ne dispose pas de base de données sur les paramètres spectroscopiques mais de sections efficaces « empiriques » mesurées. Le calcul raie par raie est très coûteux en temps de calcul (le calcul

du profil de raie notamment) et n'est donc pas adapté au calcul opérationnel. Il est toutefois important de disposer de ces outils de calcul afin de permettre la validation des algorithmes opérationnels.

II.2.2 Intensité et profil d'une raie

L'intensité d'une raie est l'intégrale sur le nombre d'onde de la fonction de probabilité d'interaction (profil de raie non normalisé) d'une molécule avec un photon. C'est donc également l'intégrale de la section efficace d'absorption sur tout le domaine spectral. Nous n'aborderons pas ici la façon de déterminer cette intensité, et nous donnerons les relations qui nous permettent de déterminer une intensité à partir de valeurs tabulées dans les banques de données spectroscopiques :

$$S(\tilde{\nu}_0, T, X) = S(\tilde{\nu}_0, T_{ref}, X) \frac{Q(T_{ref})}{Q(T)} \exp\left(-\frac{hc}{k} E'' \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \frac{\left(1 - \exp\left(-\frac{hc \tilde{\nu}_0}{kT}\right)\right)}{\left(1 - \exp\left(-\frac{hc \tilde{\nu}_0}{kT_{ref}}\right)\right)} \quad (2.11)$$

avec :

T_{ref}	température de référence (296 K)
h	constante de Planck
c	vitesse de la lumière
k	constante de Boltzmann
E''	énergie du niveau inférieur de la transition en cm^{-1}
$\tilde{\nu}_0$	nombre d'onde de la transition en cm^{-1}
$Q(T_{ref})$	fonction de partition à la température de référence
$Q(T)$	fonction de partition à la température considérée
$S(\tilde{\nu}_0, T_{ref}, X)$	intensité tabulée dans les banques de données spectroscopiques

La fonction de partition est en première approximation le produit d'un terme rotationnel par un terme vibrationnel :

$$Q(T) = Q_{rot}(T) Q_{vib}(T) \quad (2.12)$$

et la fonction de partition rotationnelle peut s'exprimer sous la forme :

$$Q_{rot}(T) = Q_{rot}(T_{ref}) \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^n \quad (2.13)$$

avec n qui prend la valeur 1 pour les molécules linéaires et 1,5 pour les autres molécules. En ce qui concerne la fonction de partition vibrationnelle elle peut s'écrire sous la forme :

$$Q_{vib}(T) = \prod_s \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\tilde{\nu}_s}{kT}\right) \right]^{-d_s} \quad (2.14)$$

avec :

- $\tilde{\nu}_s$ le nombre d'onde de la vibration du mode s
- d_s la dégénérescence de vibration du mode s et où :
 - $d_s = 1$, vibration non dégénérée
 - $d_s = 2$, vibration doublement dégénérée
 - $d_s = 3$, vibration triplement dégénérée

Pour les calculs de l'intensité des raies des espèces chimiques de l'atmosphère, on utilise les bases de données spectroscopiques HITRAN [ROT92], [ROT98], GEISA [JAC99] et de MIPAS qui sont régulièrement ré-actualisées.

Le profil d'une raie représente la probabilité d'interaction d'un photon de nombre d'onde $\tilde{\nu}$ par unité de longueur avec une molécule. Cette interaction rayonnement-matière se traduit pour la molécule par le passage d'un état quantique à un autre. La forme d'une raie d'absorption n'est pas rigoureusement monochromatique mais s'étale sur une largeur spectrale non nulle. L'expression du profil d'une raie dépend de la nature physique de la cause de l'élargissement:

➤ *Elargissement naturel* : Il trouve son origine dans le principe d'incertitude de Heisenberg appliqué aux énergies des états initial et final de la transition. Il en résulte une incertitude sur le nombre d'onde de transition $\tilde{\nu}_0$. Le profil se représente par une fonction de Lorentz dont la largeur à mi-hauteur est dite largeur naturelle de la transition. L'élargissement naturel dans l'infrarouge est en général négligeable devant les autres causes d'élargissement et constitue la limite inférieure de la largeur d'une raie spectrale.

➤ *Elargissement Doppler* : La molécule absorbe un photon de nombre d'onde $\tilde{\nu}_0$ dans son propre référentiel et, à cause de l'effet Doppler, un observateur verra les molécules qui se dirigent vers lui avec une vitesse v , absorber des photons de nombre d'onde $\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_0(1 + v/c)$. Si on suppose que le milieu est en équilibre thermodynamique local, la répartition des vitesses est gaussienne et le profil spectral qui en résulte est lui-même gaussien:

$$\Phi_{\tilde{\nu}}^D(\tilde{\nu}_0, T, X) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\gamma_D} \exp\left(-\frac{\ln 2(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)^2}{\gamma_D^2}\right) \quad (2.15)$$

la demi-largeur Doppler à mi-hauteur (en cm^{-1}) est donnée par:

$$\gamma_D = 3.58 \cdot 10^{-7} \tilde{\nu}_0 \left(\frac{T}{M_X} \right)^{1/2} \quad (2.16)$$

avec: T température cinétique en K.
 $\tilde{\nu}_0$ nombre d'onde de la transition en cm^{-1} .
 M_X masse molaire de la molécule X en g.mol^{-1} .

La demi-largeur Doppler et le profil Doppler s'obtiennent sans difficultés lorsqu'on connaît la température.

➤ *Elargissement Lorentz* : Les chocs entre la molécule absorbante et les autres molécules du milieu perturbent les états d'énergie initial et final de la transition. Il en résulte un élargissement de la raie qui peut résulter des collisions entre les molécules d'une même espèce et d'espèces différentes. On parle également d'élargissement collisionnel. La forme du profil est « lorentzienne » :

$$\Phi_{\tilde{\nu}}^L(\tilde{\nu}_0, T, P) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)^2 + \gamma_L^2} \quad (2.17)$$

La demi-largeur Lorentz à mi-hauteur est proportionnelle à la pression et dépend des espèces partenaires de collision, de la température et de la transition considérée. La demi largeur à mi-hauteur peut s'écrire comme la somme de l'élargissement dû aux collisions avec les molécules des autres gaz et de l'élargissement dû aux collisions de la molécule avec les molécules du même gaz (on indice par j les gaz présents dans le milieu):

$$\gamma_L = \sum_j \gamma_{X,j}(\tilde{\nu}_0, P_0, T_{ref}, X) \left(\frac{P_j}{P_0} \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^{n_j} \right) \quad (2.18)$$

avec:

T température cinétique en K.
 P_j pression partielle du gaz j .
 T_{ref}, P_0 température et pression de référence (298 K ; 1013,25 hPa)
 $\gamma_{X,j}$ coefficient d'élargissement par le gaz j .
 n_j facteur de dépendance en température

Les deux derniers paramètres ci-dessus sont tabulés dans la banque de données spectroscopiques pour l'air et l'auto élargissement que nous avons utilisée. Il faut toutefois signaler que la loi d'évolution en température de la demi-largeur Lorentz est empirique et que le facteur n_i est en général mal connu.

Alors que dans le cas d'un élargissement Doppler la plus grande partie de l'énergie se situe dans le pic de la raie, dans le cas d'un élargissement Lorentz c'est dans les ailes que l'on retrouvera une partie importante de l'énergie. En effet, pour une même largeur à mi-hauteur, la raie Lorentz est beaucoup plus étendue en nombre d'onde que la raie Doppler comme on peut le voir sur la figure II.4.

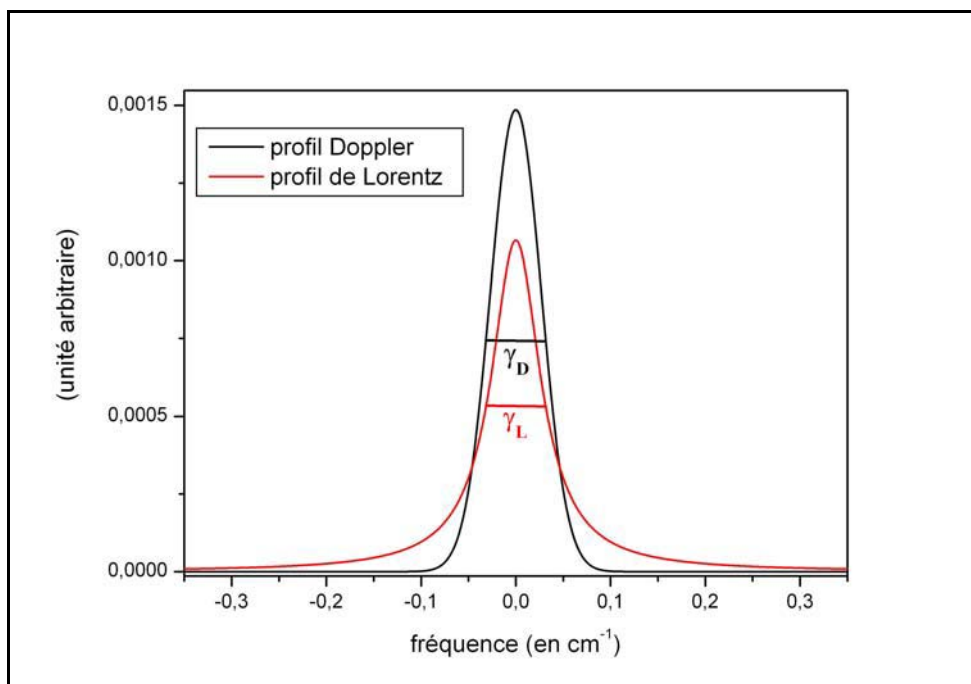


Figure II.4 : Profils Doppler et Lorentz (normalisés à 1) pour des raies d'absorption d'égales largeur à mi-hauteur.

➤ *Élargissement combiné Doppler et Lorentz* : La figure II.4 montre les allures comparées des profils normalisés Doppler et Lorentz. L'élargissement collisionnel est le plus important dans les conditions de pression élevée. Cependant, pour de faibles pressions ou pour des températures élevées, l'élargissement Doppler n'est plus négligeable et le profil est alors le produit de convolution des deux profils Doppler et Lorentz. Le profil dû aux deux causes d'élargissement combinées est appelé profil de Voigt :

$$\Phi_{\nu} = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\gamma_D} Y \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{(X-t)^2 + Y^2} dt \quad (2.19)$$

avec:

$$X = \sqrt{\ln 2} \frac{\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0}{\gamma_D} \quad (2.20)$$

$$Y = \sqrt{\ln 2} \frac{\gamma_L}{\gamma_D} \quad (2.21)$$

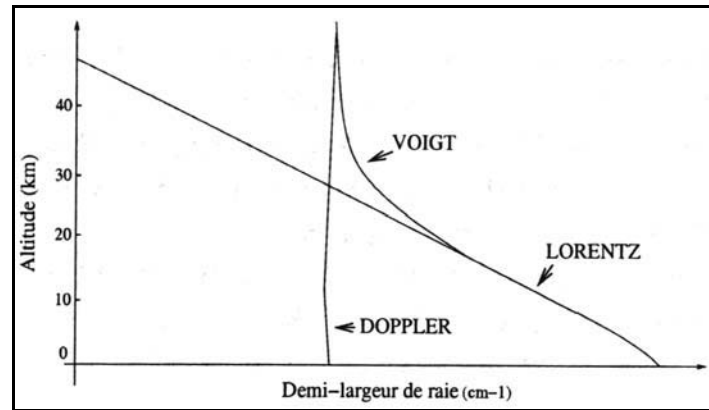


Figure II.5 : Schéma qualitatif de l'importance relative des différents profils de raies suivant l'altitude [MÜL84]

Grossièrement, on peut dire que l'élargissement Lorentz est prépondérant aux basses altitudes atmosphériques où la densité moléculaire est importante, alors que l'élargissement Doppler est prépondérant aux hautes altitudes (*Fig. II.5*). Cependant ce découpage du problème en fonction de l'altitude reste schématique et dépend fortement des espèces considérées. D'autre part, comme on l'a vu, le calcul des profils et des demi-largeurs de raies n'est pas trivial et peut être la source d'erreurs difficilement caractérisables puisque les calculs, dépendent de la qualité des banques de données spectroscopiques.

II.2.3 Sections efficaces et « look-up tables »

Nous avons vu précédemment lors du calcul du profil de raie, que celui-ci dépend de la température et de la pression de la couche considérée. Dans le calcul d'un spectre synthétique pour une espèce chimique donnée et un nombre d'onde donné, on considère donc un couple de températures et de pressions pour déterminer le coefficient d'absorption. Le nombre de raies considérées dans des fenêtres spectrales relativement grandes (typiquement 100 cm^{-1}) et le nombre de jeu de températures et de pressions ainsi que le nombre de raies font que le calcul devient vite très important. Dans un souci d'optimisation du temps de calcul et de réduction du nombre d'opérations nous avons utilisé des sections efficaces pré-calculées, avec une grille de températures et de pressions recouvrant le domaine atmosphérique.

Ces sections efficaces accessibles dans des tables (look-up tables), calculées une fois pour toutes peuvent être utilisées pour différents spectres et expériences (dans le même domaine spectral). Lors du calcul d'un spectre, les sections efficaces utiles sont interpolées en température et en pression à partir de « look-up tables ». Il n'est plus nécessaire ainsi de calculer toutes les sections efficaces pour toutes les températures et pression à chaque itération de l'algorithme. Pour le système d'interpolation nous avons choisi une méthode logarithmique pour la pression et linéaire pour la température. Il s'est avéré d'après les travaux d'Eremenko [ERE03] que cette méthode est le meilleur compromis entre le temps de calcul et l'erreur commise par rapport au calcul sans interpolation. L'interpolation logarithmique se fait sur un tableau à deux dimensions, autrement dit entre deux températures et deux logarithmes de pression, soit quatre couples T et $\ln P$.

Nous rappelons tout d'abord l'équation d'interpolation d'une fonction $f(x)$ (où x est la grandeur que l'on interpole : une pression, un rapport de mélange...) qui varie logarithmiquement entre deux valeurs tabulées $f(x_i)$, $f(x_{i+1})$ et où $x_i \leq x \leq x_{i+1}$:

$$\ln f(x) = \ln f(x_{i+1}) - \frac{x - x_{i+1}}{H}, \quad H = \frac{x_i - x_{i+1}}{\ln \frac{f(x_{i+1})}{f(x_i)}} \quad (2.22)$$

Maintenant ce que l'on recherche c'est l'interpolation d'une section efficace comprise entre 2 températures qui varient linéairement et 2 pressions qui varient de manière logarithmique (Fig. II.6). Si l'on prend 2 pressions P_i et P_{i+1} ainsi que P une pression comprise entre P_i et P_{i+1} on peut les redéfinir sous la forme d'un logarithmique :

$$\begin{cases} x_i = \ln P_i \\ x = \ln P \quad \text{où } x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ x_{i+1} = \ln P_{i+1} \end{cases} \quad \text{et pour les températures on peut définir} \quad \begin{cases} y_i = T_i \\ y = T \quad \text{où} \\ y_{i+1} = T_{i+1} \end{cases}$$

$$y_i \leq y \leq y_{i+1}$$

Pour chaque nombre d'onde du domaine spectral considéré, on a une fonction de deux paramètres. L'équation d'interpolation à deux dimensions est alors:

$$\begin{aligned}
 \ln f(x, y) = & (1 - A) \cdot (1 - B) \cdot \ln f(x_i, y_j) \\
 & + (1 - A) \cdot B \cdot \ln f(x_{i+1}, y_j) \\
 & + A \cdot (1 - B) \cdot \ln f(x_i, y_{j+1}) \\
 & + A \cdot B \cdot \ln f(x_{i+1}, y_{j+1})
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

où:

$$A = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad B = \frac{y - y_j}{y_{j+1} - y_j} \tag{2.24}$$

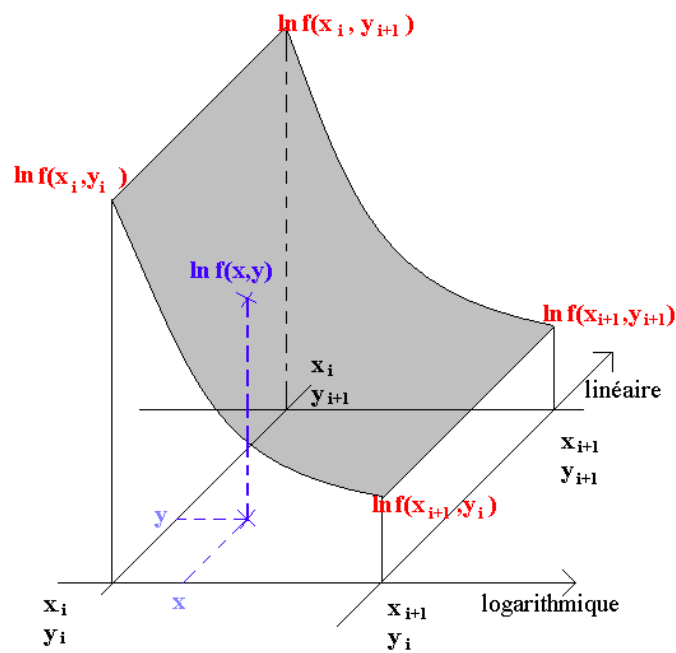


Figure II.6 : Schéma d'interpolation à deux dimensions.

La valeur $f(x, y)$ est la section efficace recherchée et qui correspond à la température T et la pression P . Il est à noter que (2.23) ressemble fortement à une interpolation bilinéaire à ceci près que l'on prend le logarithme de la fonction f . Il s'est avéré que l'interpolation à travers un logarithme de la fonction f donnait de meilleurs résultats qu'à travers une interpolation linéaire de f .

II.3 Spectres simulés

Dans les paragraphes précédents nous avons établi les relations physiques qui relient le spectre en émission thermique observé aux constituants de l'atmosphère. En réalité les spectres que l'on observe prennent en compte d'autres phénomènes qui viennent s'ajouter au calcul direct de type raie par raie. Parmi ces phénomènes que l'on prend en compte lors de la modélisation des spectres infrarouges et qui ne peut être imputable aux raies spectroscopiques est l'influence de l'instrument permettant leur d'acquisition. En effet chaque instrument induit un effet sur les spectres. Cette « signature » de l'instrument est bien spécifique et il est impératif d'en tenir compte lors du calcul des spectres synthétiques. Certains de ces phénomènes qui sont d'origine spectroscopique sont encore mal modélisés et prennent en compte des modèles semi-empiriques qui sont en accord avec l'expérience comme c'est le cas pour les continua ou le « line-mixing ».

II.3.1 Les continua

Lors du calcul du spectre synthétique nous devons aussi considérer plusieurs phénomènes moléculaires. L'un d'eux est le continuum de la vapeur d'eau. Il reste encore un phénomène difficile à mesurer en laboratoire mais qui apparaît dans les spectres atmosphériques. Son interprétation et sa modélisation théorique sont encore sujet à étude mais sa modélisation empirique permet déjà de bien reproduire le continuum lors des calculs de spectres.

L'interprétation actuellement acceptée (tout du moins pour une grande part du continuum) est qu'il est dû aux ailes lointaines des transitions permises, qui induisent cet effet. Mais il reste aussi des contributions, moins bien définies, dues éventuellement à l'absorption induite par les collisions et aux complexes de Van der Waals. Dans le programme de calcul de spectres nous avons implémenté un continuum de la vapeur d'eau qui tient compte de la contribution des ailes lointaines des raies élargies par collision. Les effets de l'écart à la forme de raie Lorentz sont traités de façon semi-empirique pour fournir un accord avec les résultats expérimentaux concernant le continuum d'absorption et sa dépendance en température. Le modèle qui a été utilisé pour les modélisations de nos spectres est celui de Clough, Knezy et Davies : CKD 2.4 [CLO89] qui considère les effets des collisions H_2O-H_2O et H_2O-N_2 et leur dépendance en fonction de la température. Il existe d'autres approches pour traiter le continuum de la vapeur d'eau avec une interprétation différente du phénomène comme le

modèle de Tipping et Ma [TIP95] qui est basé sur une approche quasi-statique à partir d'une surface de potentiel intermoléculaire, et plus récemment le modèle MT-CKD (Mlawer, Tobin, Clough, Knezy, Davies), qui est encore en cours de validation. En plus de la contribution des ailes de toutes les raies permises et sur tout le domaine spectral, ce nouveau formalisme du continuum considère la contribution des dipôles induits.

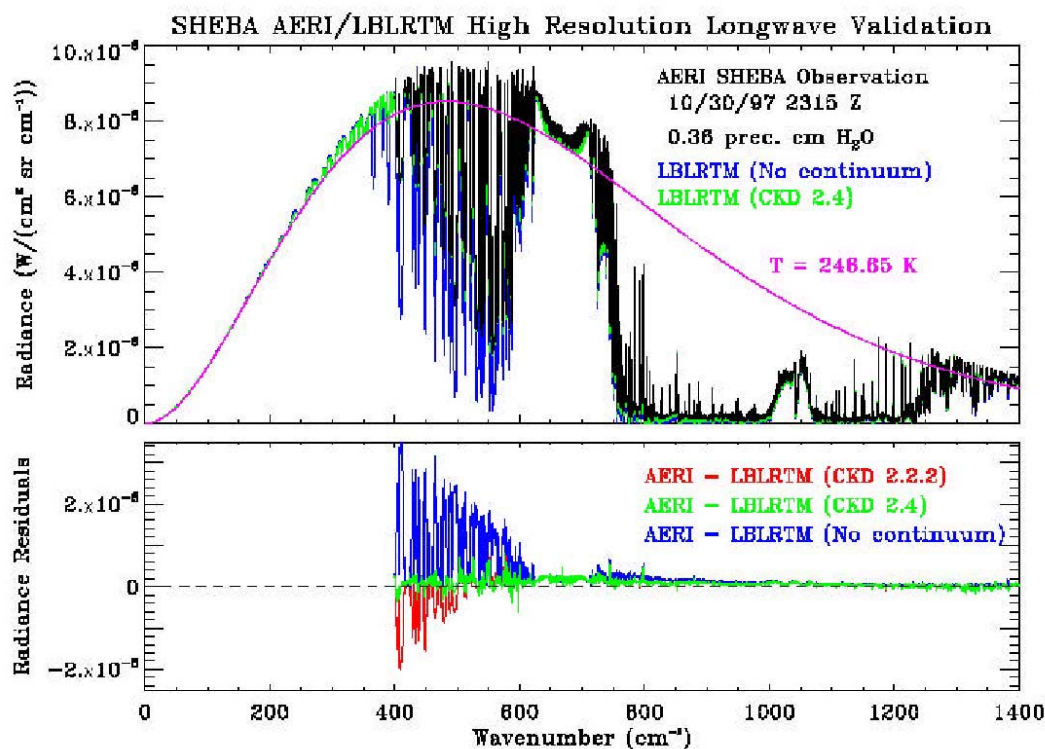


Figure II.7: Exemple de comparaison d'un spectre mesuré par AERI (en noir) avec des simulations de spectres sans la prise en compte du continuum (en bleu) avec la version CKD 2.2.2 (en rouge) et avec la version CKD 2.4 (en vert). La différence entre le spectre mesuré et les spectres calculés apparaît en dessous. [MLA99]

Il existe d'autres types de continuum, qui prennent en compte des effets collisionnels entre molécules homonucléaires uniquement (qui n'ont pas de spectre dipolaire électrique). C'est le cas pour le continuum du dioxygène [THI97] et celui du diazote [BOR86]. Ces continua résultent des spectres induits par collisions. Lors des collisions les niveaux d'énergie varient au cours de l'interaction entre molécules. Pendant le « temps de relaxation » que mettent les niveaux d'énergie à revenir à leur état normal non perturbé (molécule isolée), des transitions d'absorption ou d'émission peuvent avoir lieu. Il n'y a plus alors de raies fines et discernables mais une structure complexe que l'on peut caractériser comme un continuum. Les continua de ces deux molécules sont pris en compte lors du calcul de nos spectres synthétiques. L'absorption induite par (N_2 et O_2) est un phénomène qui, bien que généralement faible, peut

être observé pour N_2 et O_2 du fait de leur grande abondance dans l'atmosphère et de trajets optiques importants.

II.3.2 Interférences entre raies ou « line-mixing »

Lorsque les raies de vibration-rotation d'une bande sont suffisamment élargies par les collisions, les profils de raies se recouvrent notablement, les raies ne peuvent plus alors être considérées comme isolées. C'est une situation que l'on rencontre dans les ailes de bandes ou au voisinage de leurs centres si la pression est suffisamment élevée. Elle apparaît aux densités modérées de l'atmosphère dans des régions où les raies sont très proches les unes des autres, c'est le cas des branches Q et de certains doublets ou multiplets.

Ce phénomène d'interférences entre raies ou effet de « line-mixing » existe en principe pour toutes les molécules présentes dans l'atmosphère mais ils sont les plus notables pour CO_2 . Le profil est modifié au voisinage des branches Q (où les raies sont généralement serrées) au fait du « line-mixing ». La position de la raie reste la même mais on constate que la forme Lorentzienne habituelle est modifiée (*Fig. II.8*).

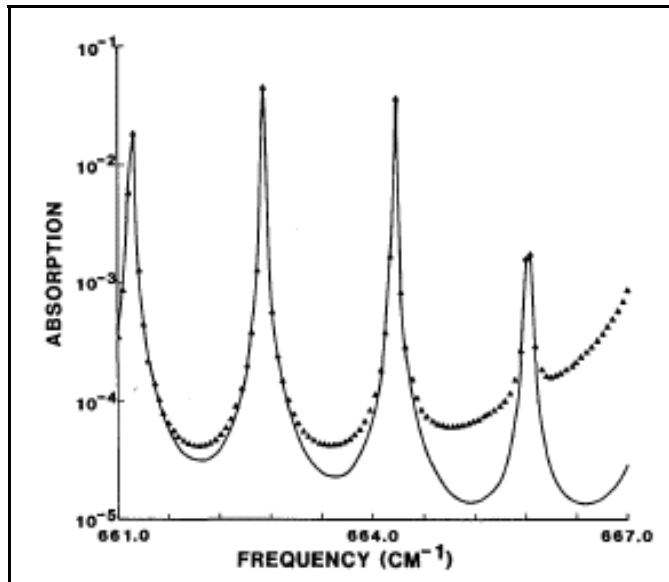


Figure II.8 : Coefficient théorique d'absorption en fonction de la fréquence dans la région 661-667 cm^{-1} , (bande ν_2 de CO_2), pour une pression de 10 Torr et une température de 300 K. La courbe continue correspond au cas où on prend en compte l'effet de « line-mixing » la courbe en pointillés au cas où on ne le prend pas en. [\[ARM82\]](#)

Il existe aussi des études sur le « line-mixing » du méthane et sur sa contribution dans les spectres atmosphériques [\[PIE01\]](#). Ils sont plus complexes à prendre en compte car le

recouvrement des bandes ne se fait plus uniquement dans les branches Q. Seul le « line-mixing » de CO₂ a été pris en compte dans nos calculs. Les codes de transfert radiatif habituellement utilisés dans la même région spectrale (600 - 2800 cm⁻¹) ne tiennent pas encore compte du « line-mixing » pour CH₄ dans les branches Q. Pour le méthane, on observe les effets du couplage entre raies dans les spectres atmosphériques autour de 1300 cm⁻¹ et de 3000 cm⁻¹. Une modélisation de l'effet du « line-mixing » dans la branche Q de la ν_4 (environ 1300 cm⁻¹) n'est pas encore disponible. Elle existe pour la bande ν_3 (environ 3000 cm⁻¹) mais cette région est à la limite du domaine spectral de l'infrarouge thermique couvert par IASI et IASI-ballon.

II.3.3 Prise en compte des effets instrumentaux

Jusqu'à présent, le calcul de spectres synthétiques à été considéré sans tenir compte des effets instrumentaux et en particulier de la fonction d'appareil, c'est-à-dire de la résolution instrumentale. Les spectres correspondants sont définis comme étant à résolution infinie. L'utilisation d'un interféromètre conduit à une dégradation du spectre théorique et on obtient un spectre dit « à la résolution de l'appareil ». Celui-ci est défini comme le produit de convolution du spectre à résolution infinie par la fonction d'appareil :

$$T_{spec}(\tilde{\nu}) = T_{calc}(\tilde{\nu}) \otimes Fap(\tilde{\nu}) \quad (2.25)$$

La fonction d'appareil peut évoluer en fonction des conditions d'environnement auxquelles l'instrument est soumis et si ces conditions changent au cours des mesures, comme lors de l'acquisition des spectres ballon, il est nécessaire de modéliser ces variations. La fonction d'appareil non apodisée du spectromètre embarqué du LPMA a été modélisée de la manière suivante :

$$Fap(\tilde{\nu}) = f_1(\tilde{\nu}) + f_2(\tilde{\nu} - d) \quad (2.26)$$

où f_1 est une fonction sinus cardinal centrée en $\tilde{\nu} = 0$ et f_2 le mélange d'une gaussienne et d'une lorentzienne décentré de $\tilde{\nu} = d$ par rapport à f_1 , ces deux fonctions étant amorties à partir d'un certain écart en nombre d'onde par rapport au centre de la fonction d'appareil. La

fonction est normalisée à 1. L'expression analytique de la fonction $f_1(\tilde{\nu})$, avant normalisation, est la suivante.

$$f_1(\tilde{\nu}) = a_1 \frac{\sin(2\pi\tilde{\nu}d_1)}{2\pi\tilde{\nu}d_1} \quad \text{si } |\tilde{\nu}| \leq \frac{1}{2d_1} \quad (2.27)$$

$$f_1(\tilde{\nu}) = a_1 \frac{\sin(2\pi\tilde{\nu}d_1)}{2\pi\tilde{\nu}d_1} \exp\left(-m_1\left(|\tilde{\nu}| - \frac{1}{2d_1}\right)\right) \quad \text{si } |\tilde{\nu}| > \frac{1}{2d_1} \quad (2.28)$$

où : a_1 est l'amplitude relative du sinus cardinal

m_1 le coefficient d'amortissement

d_1 différence de marche maximum

Nous préférons par la suite considérer la largeur à mi-hauteur r_1 du sinus cardinal plutôt que d_1 . En effet r_1 peut être assimilé à la résolution de l'instrument (exprimée en nombre d'onde).

Les deux grandeurs sont reliées par la relation :

$$d_1 = \frac{1,207}{2r_1} \quad (2.29)$$

La deuxième fonction intervenant dans la fonction d'appareil, avant la normalisation a pour expression :

$$f_2(\tilde{\nu}) = a_2 \left(m_2 \exp\left(-\left(\frac{\tilde{\nu}}{r_2}\right)^2 \log 2\right) + \frac{1-m_2}{1+\left(\frac{\tilde{\nu}}{r_2}\right)^2} \right) \quad (2.30)$$

où : a_2 est l'amplitude relative du mélange gaussien-lorentzienne

m_2 le poids respectif de la gaussienne par rapport à la lorentzienne

r_2 la demi largeur à mi-hauteur de la gaussienne et de la lorentzienne

La fonction d'appareil dépend donc de sept paramètres (en fait 6 à cause de la normalisation) qui ne sont pas très bien connus a priori. Le programme d'inversion qui intègre la fonction d'appareil peut permettre l'ajustement de ces paramètres instrumentaux.

En plus de l'effet de la fonction d'appareil sur les spectres, il arrive aussi que les nombres d'onde des points du spectre mesuré ne correspondent pas aux nombres d'onde réels.

Ils sont décalés spectralement d'une quantité appelée décalage spectral ou *shift* et qui peut varier d'un intervalle spectral à un autre :

$$\tilde{\nu}_{vrai} = \tilde{\nu}_{brut} - shift \quad (2.31)$$

Le shift est mal caractérisé en vol et peut varier lentement (dérive thermique du laser de référence,...) avec le domaine spectral. Une erreur sur son estimation ayant des effets significatifs sur la restitution des profils de concentration, il est nécessaire de considérer le shift comme un paramètre supplémentaire à ajuster dans le modèle d'inversion. L'équation (2.25) permet de considérer le shift dans la fonction d'appareil qui s'écrit alors :

$$Fap(\tilde{\nu}) = f_1(\tilde{\nu} + \tilde{\nu}_{shift}) + f_2(\tilde{\nu} + \tilde{\nu}_{shift} - d) \quad (2.32)$$

II.4 Inversion des spectres

Ce paragraphe sur l'inversion des spectres est inspirée du travail de thèse de Sébastien Payan [PAY96]. Il nous a semblé important de détailler cette partie qui permet de comprendre la méthode d'ajustement des spectres. De plus le travail de ce mémoire ayant utilisé intensivement le programme LARA développé au cours des années au LPMA il est utile de présenter en détail la procédure d'inversion.

II.4.1 Le concept de l'inversion

Lorsqu'on peut déterminer directement à l'aide de mesures *in situ* les paramètres atmosphériques tel que la température, la pression ou les concentrations des différents constituants, le problème de l'inversion ne se pose pas. Cependant la nécessité de disposer de mesures globales a conduit à un grand développement des mesures à distance et au traitement de ces mesures pour la restitution indirecte de la grandeur locale à laquelle on veut accéder. Le passage entre la grandeur mesurée et les paramètres recherchés nécessite la résolution d'un problème inverse. En effet pour le cas de spectres atmosphériques, le signal infrarouge et le profil des raies que l'instrument IASI-ballon enregistre dépendent de nombreux facteurs : comme la température des couches traversées, la pression ou le rapport de mélange des espèces chimiques présentes dans l'atmosphère. Pour remonter à cette information physique, il faut donc établir un modèle d'inversion des spectres pour déterminer les profils verticaux de concentration des constituants atmosphériques.

Le problème est d'utiliser au mieux l'information dont on dispose. Dans notre cas, il s'agit de l'information contenue dans l'ensemble des spectres correspondant à des situations différentes et donc caractéristiques de la scène visée au nadir.

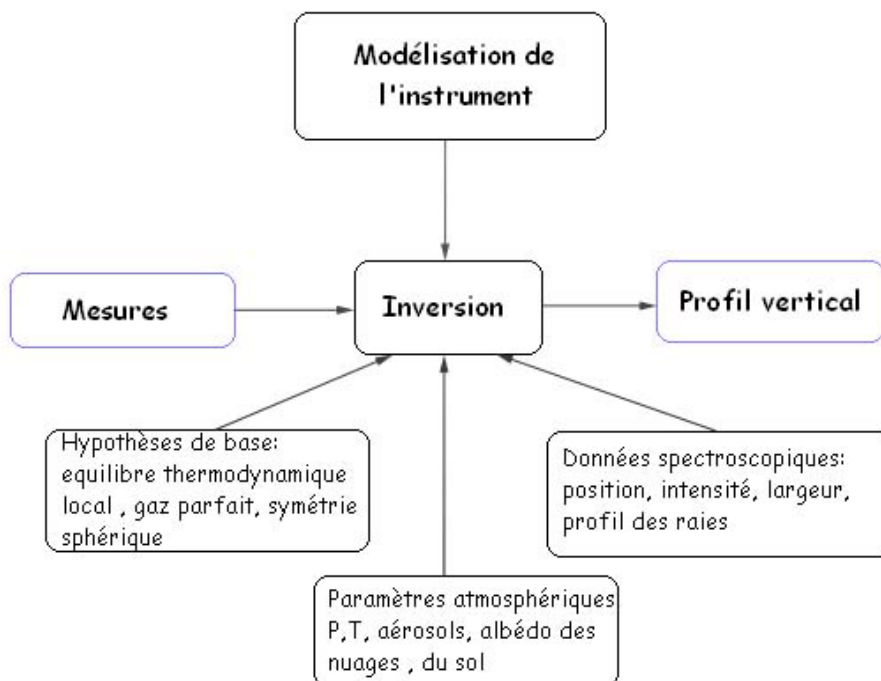


Figure II.9 : Processus d'inversion

Dans la majorité des cas le signal reçu par un senseur embarqué n'est pas directement interprétable en terme de paramètres atmosphériques. Il faut pour chaque instrument mettre au point un algorithme permettant, à partir des spectres mesurés, de remonter aux profils de concentration recherchés. On utilise le terme générique de méthodes d'inversion pour désigner un algorithme de ce type. La figure II.9 présente schématiquement les différents processus à considérer lors de l'inversion et de la restitution des profils verticaux. Dans tous les cas il faut savoir traiter le problème direct, c'est-à-dire disposer d'un algorithme permettant de calculer un spectre en fonction des paramètres d'entrée du modèle physiques.

II.4.2 Méthode d'ajustement des spectres par les moindres carrés

La méthode des moindres carrés a fait l'objet de nombreuses présentations [\[CHAN77\]](#), [\[CHAV88\]](#), [\[SCO71\]](#), [\[LIN63\]](#). Pour la rédaction de ce qui suit dans ce chapitre, nous nous sommes inspirés des présentations de Armante [\[ARMA92\]](#) et de

Lamoulie [LAM88] mais nous avons aussi utilisé les notations introduites par Rodgers [ROD76] et Clough [CLO95].

Nous utiliserons dans la suite les notations suivantes : l'indice i correspond à un élément spectral donné (et on appelle npt le nombre total de points considérés), alors que l'indice j (ou k) représentera un des np paramètres à déterminer (la détermination des paramètres ne sera évidemment possible que si la condition $npt \geq np$ est vérifiée). Nous appellerons Y la grandeur mesurée (ici la radiance spectrale), \hat{Y} (ou $F(X)$) la radiance calculée par le modèle, X les paramètres à déterminer et E l'écart entre les spectres calculés et mesurés.

La relation générale entre grandeurs mesurées et paramètres du modèle s'écrit sous la forme :

$$y_i = \hat{y}_i + e_i = f_{ij}(x_j) + e_i \quad (2.33)$$

Plaçons-nous dans un cas simple où la mesure peut-être restituée par un modèle linéaire. L'équation (2.33) peut alors se réécrire sous la forme matricielle :

$$Y = \hat{Y} + E = FX + E \quad (2.34)$$

Le spectre \hat{Y} est aussi appelé spectre synthétique.

Nous cherchons à déterminer les paramètres x_j qui reproduisent au mieux la mesure, c'est-à-dire ceux pour lesquels les écarts $e_i (= y_i - f_{ij}(x_j))$ sont les plus faibles possibles. Cela revient à minimiser la fonction de χ^2 défini par :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{npt} \frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{(\Delta y_i)^2} = \sum_{i=1}^{npt} (y_i - \hat{y}_i)^2 w_i \quad (2.35)$$

où Δy_i représente l'écart type sur la mesure y_i et $w_i = 1/\Delta y_i^2$ le poids correspondant.

On définit également le χ^2 réduit (noté χ_r^2) par :

$$\chi_r^2 = \frac{\chi^2}{npt - np} \quad (2.36)$$

On définit ensuite un critère de qualité de l'ajustement qui sera d'autant meilleur au sens statistique qu'il sera proche de 1.

Lorsque le χ_r^2 est > 1 , l'inversion n'est pas satisfaisante.

Lorsque le χ_r^2 est < 1 , les valeurs des erreurs sur les mesures sont vraisemblablement sur-estimées.

Nous avons vu précédemment que les paramètres x_j recherchés sont ceux qui minimisent la fonction de χ^2 que l'on peut réécrire en notation matricielle :

$$\chi^2 = E^T W E \quad (2.37)$$

où E^T représente la transposée de la matrice $E = Y - \hat{Y}$ et où W est la matrice diagonale ayant pour éléments diagonaux les poids w_i , (l'inverses des variances). Il est à noter que W peut avoir des éléments non diagonaux lorsqu'il y a corrélation entre les points spectraux.

Une condition nécessaire pour que le χ^2 soit minimum est que sa dérivée par rapport à chaque paramètre soit nulle :

$$\left(\frac{\partial \chi^2}{\partial X} \right) = 0 \Leftrightarrow \left(\frac{\partial \chi^2}{\partial x_j} \right) = 0 \text{ pour } j \in [1, np], j \in \mathbf{N} \quad (2.38)$$

En utilisant la notation matricielle (2.37) et en utilisant l'expression de E déduite de l'équation (2.34), l'équation ci dessus peut s'écrire :

$$\frac{\partial}{\partial X} \left\{ (Y - FX)^T W (Y - FX) \right\} = 0 \quad (2.39)$$

En utilisant la théorie des matrices on montre que l'équation précédente est équivalente à :

$$(F^T W F) X = F^T W Y \quad (2.40)$$

L'équation (2.40), appelée équation normale, a pour solution :

$$X = (F^T W F)^{-1} F^T W Y \quad (2.41)$$

Dans la mesure où $npt - np \gg 1$, une estimation de l'erreur sur les paramètres (intervalle de confiance à 68%) est donnée par :

$$\left[x_j - \sqrt{(F^T W F)^{-1}_{jj} \chi^2}, x_j + \sqrt{(F^T W F)^{-1}_{jj} \chi^2} \right] \quad (2.42)$$

où x_j est l'estimation déduite de (2.41) pour le $j^{ème}$ paramètre recherché.

Le modèle utilisé pour reproduire la mesure est dans la plupart des cas non linéaires, c'est-à-dire qu'il n'y a pas de relation matricielle $Y = FX$. Cependant dans certains cas

particuliers il est possible de linéariser l'équation (2.33) à l'aide d'un changement de variable approprié [LEF76] :

$$y_i = f_{ij}(x_j) + e_i \xrightarrow{g} y_i' = f_{ij}' x_j + e_i' \quad (2.43)$$

avec :

$$y_i' = g(y_i) \quad (2.44)$$

$$f_{ij}' x_j + e_i' = g(f_{ij}(x_j) + e_i) \quad (2.45)$$

Cette linéarisation nécessite de modifier les poids. En effet, en posant $y_i = g^{-1}(y_i')$ et $\hat{y}_i = g^{-1}(\hat{y}_i')$ on peut au voisinage de la solution écrire :

$$y_i - \hat{y}_i = (y_i' - \hat{y}_i') \frac{\partial g^{-1}}{\partial y_i'} \quad (2.46)$$

On doit donc minimiser :

$$\sum_{i=1}^{npt} (y_i - \hat{y}_i)^2 w_i = \sum_{i=1}^{npt} (y_i' - \hat{y}_i')^2 \left(\frac{\partial g^{-1}}{\partial y_i'} \right)^2 w_i \quad (2.47)$$

soit :

$$\sum_{i=1}^{npt} (y_i' - \hat{y}_i')^2 w_i' \quad (2.48)$$

où les nouveaux poids w_i' ont pour expression :

$$w_i' = \frac{w_i}{\left(\frac{\partial g}{\partial y_i} \right)^2} \quad (2.49)$$

puisque les dérivées partielles de la fonction de changement de variable et de son inverse sont reliées par :

$$\left(\frac{\partial g^{-1}}{\partial y_i'} \right) = \frac{1}{\left(\frac{\partial g}{\partial y_i} \right)} \quad (2.50)$$

On ramène alors la minimisation au cas linéaire puisque par hypothèse :

$$y_i' = f_{ij}' x_j + e_i' \quad (2.51)$$

Lorsque la relation (2.33), liant les paramètres du modèle et les valeurs mesurées, est intrinsèquement non linéaire ([CHAN77] ; [CHAV88] ; [RAL78]), on peut essayer de

linéariser le modèle par un développement de Taylor au voisinage de la solution initiale X^0 . On peut alors écrire :

$$y_i = f_i(X^0) + \sum_{j=1}^{np} (x_j - x_j^0) \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)_{X=X^0} + \sum_{j=1}^{np} \sum_{k=1}^{np} \frac{1}{2} (x_j - x_j^0)(x_k - x_k^0) \left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k} \right)_{X=X^0} + \dots \quad (2.52)$$

En ne retenant dans (2.52) que les termes linéaires en X , on obtient à la place de l'équation (2.34) :

$$Y = F(X^0) + K(X^0)(X - X^0) + E_2 \quad (2.53)$$

dans laquelle :

$F(X^0)$ représente la valeur du modèle pour les paramètres initiaux X^0 ,

$K(X^0)$ représente la matrice dérivée (jacobienne) du modèle par rapport aux paramètres, au voisinage de la solution initiale X^0 avec :

$$k_{i,j} = \frac{\partial f_i(X)}{\partial x_j} \quad (2.54)$$

E_2 représente le vecteur écart qui peut avoir des propriétés statistiques différentes du vecteur E introduit en (2.34), à cause de la linéarisation effectuée.

L'équation (2.53) se réécrit alors sous la forme :

$$Y = F(X^0) + K(X^0)\Delta X + E_2 \quad \text{avec : } \Delta X = X - X^0 \quad (2.55)$$

On peut ensuite appliquer la méthode des moindres carrés linéaires sur ΔX , ce qui conduit à l'équation normale suivante :

$$(K^T W K) \Delta X = K^T W (Y - F(X)) \quad (2.56)$$

c'est-à-dire :

$$\Delta X = (K^T W K)^{-1} K^T W (Y - F(X)) \quad (2.57)$$

Dans la pratique, l'algorithme d'inversion est itératif comme dans l'organigramme représenté sur la figure II.10 montrant le processus d'ajustement.

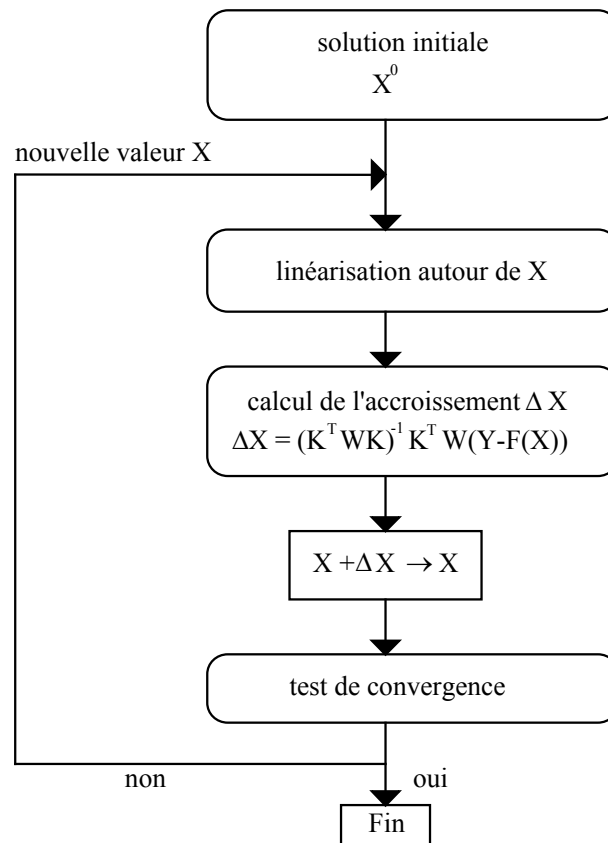


Figure II.10 : Organigramme de l'algorithme d'inversion de la méthode des moindres carrés avec amortissement.

Dans la mesure où le développement de Taylor limité au premier ordre (2.53) n'est pas strictement exact, la valeur de l'accroissement des paramètres ΔX obtenue par la résolution de l'équation (2.56) peut s'avérer non réaliste et être en particulier très sensible au bruit de mesure (incertitude sur les observations Y). Dans ces conditions, il peut être intéressant au cours du processus itératif décrit dans le schéma de la figure II.10 de limiter les variations des paramètres. On parle alors de moindres carrés avec amortissement [BAR78], ce qu'on réalise en remplaçant la fonction du χ^2 introduite en (2.35) par la nouvelle fonction Z (fonction coût) définie par :

$$Z = E^T W E + \lambda \Delta X^T S_a^{-1} \Delta X \quad (2.58)$$

avec :

$$E = Y - \hat{Y} = Y - F(X) \quad (2.59)$$

où λ est le paramètre d'amortissement et où S_a est une estimation *a priori* de la matrice variance-covariance des paramètres (supposée diagonale ici). On pénalise ainsi au cours du processus itératif les variations trop importantes des paramètres par rapport à leurs erreurs

telles qu'elles peuvent être estimées *a priori*. En effet, les éléments diagonaux de la matrice variance-covariance donnent une estimation statistique de l'erreur sur la détermination des paramètres. L'introduction d'un amortissement implique une contrainte sur la variation de ces paramètres lors de l'ajustement dans un domaine limité approximativement par la valeur de leurs erreurs.

Après linéarisation, la minimisation de la nouvelle fonction coût Z définie en (2.58) conduit à un nouvel accroissement calculable par :

$$\Delta X = (K^T W K + \lambda S_a^{-1})^{-1} K^T W (Y - F(X)) \quad (2.60)$$

On retrouve sous cette forme l'expression utilisée par Rodgers [\[ROD76\]](#) et par Clough [\[CLO95\]](#).

Deux écueils sont à éviter :

- si λ est trop grand (fort amortissement), la solution aura tendance à rester confinée au voisinage de la solution initiale X^0 , même si ce n'est pas la solution optimale;
- si λ est trop faible, on est quasiment ramené au cas des moindres carrés sans amortissement (c'est le cas si on fait $\lambda = 0$ dans l'équation (2.58)).

En fait, dans notre programme, le paramètre λ est modifié au cours du processus d'itération et en principe tend vers zéro lorsque la méthode converge. En pratique, lorsqu'on a obtenu une solution qui semble satisfaisante, on repart de cette solution comme valeur initiale avec un amortissement nul et on vérifie que la nouvelle solution ne diffère pas de la solution initiale (écarts inférieurs aux erreurs sur les paramètres). Cela revient à dire que le choix judicieux du paramètre λ permet de plus ou moins accélérer la convergence, mais n'affecte pas en principe la solution trouvée.

II.4.3 Méthode de Levenberg-Marquardt

Nous abordons dans ce paragraphe une méthode qui ne cherche pas à se ramener à une forme linéaire de la relation entre les grandeurs mesurées et les paramètres que l'on cherche à déterminer, mais qui consiste en une procédure permettant d'améliorer à chaque étape d'un processus itératif, les valeurs initiales d'un ensemble de paramètres donnés, et ceci en minimisant la fonction de mérite χ^2 définie précédemment (équation (2.35) et (2.36)). Pour la rédaction de ce paragraphe, nous nous sommes largement inspirés de *Numerical Recipes in Fortran* [\[PRE92\]](#).

Supposons que la fonction χ^2 (expression (2.35) et (2.37)) puisse être approximée par une forme quadratique :

$$\chi^2(X) = \chi^2(X^0) + (X - X^0)^T B + \frac{1}{2} (X - X^0)^T D (X - X^0) \quad (2.61)$$

où B est le vecteur gradient et D la matrice Hessienne dont les éléments sont respectivement définis par :

$$b_j = \frac{\partial \chi^2(X^0)}{\partial x_j} = -2 \sum_{i=1}^{npt} w_i (y_i - \hat{y}_i) \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_j} \quad j=1, np \quad (2.62)$$

$$d_{j,k} = \frac{\partial^2 \chi^2(X^0)}{\partial x_j \partial x_k} = 2 \sum_{i=1}^{npt} w_i \left(\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_k} - (y_i - \hat{y}_i) \frac{\partial^2 \hat{y}_i}{\partial x_j \partial x_k} \right) \quad j, k=1, np \quad (2.63)$$

Afin de se ramener à une écriture matricielle plus répandue du problème ([\[ROD76\]](#) ; [\[CLO95\]](#)), on définit la matrice K et la matrice L de la manière suivante :

$$K_{i,j} = \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial x_j} \quad j=1, np \quad i=1, npt \quad (2.64)$$

$$L_{i,jk} = \frac{\partial^2 \hat{y}_i}{\partial x_j \partial x_k} \quad j, k=1, np \quad i=1, npt \quad (2.65)$$

On peut alors exprimer le vecteur B et la matrice D de la manière suivante :

$$B = -2K^T W E \quad (2.66)$$

$$D = 2(K^T W K + L^T W E) \quad (2.67)$$

Si $\Delta X = X - X^0$, on peut réécrire l'équation (2.61) sous la forme :

$$\chi^2(X) = \chi^2(X^0) - 2\Delta X^T K^T W E + \Delta X^T (K^T W K + L^T W E) \Delta X \quad (2.68)$$

En dérivant l'équation (2.68) par rapport à X, on obtient :

$$\nabla \chi^2(X) = -2K^T W E + 2(K^T W K + L^T W E) \Delta X \quad (2.69)$$

Si X minimise $\chi^2(X)$ alors $\nabla \chi^2(X) = 0$ et d'après (2.69) on a :

$$\Delta X = (K^T W K + L^T W E)^{-1} (K^T W E) \quad (2.70)$$

Cet ensemble d'équations est résolu pour l'incrément ΔX qui nous donne les nouvelles valeurs des paramètres pour l'itération suivante (si celles-ci améliorent effectivement le χ^2) :

$$X \rightarrow X^0 + \Delta X \quad (2.71)$$

L'utilisation de l'équation (2.70) implique que l'on soit capable de calculer le gradient et la Hessienne du χ^2 ceci ne pose pas de problème en principe puisqu'on sait écrire le modèle direct. En effet, le χ^2 donné par l'expression (2.35) ne dépend que des valeurs de la grandeur mesurée, de leur estimation par le modèle direct ($\hat{Y} = F(X)$) et de l'incertitude entre valeur mesurée et estimation du modèle. Lorsqu'on dérive par rapport aux paramètres recherchés, il ne reste que le terme dépendant du modèle et le calcul des dérivées est donc possible.

On peut constater que les éléments des matrices K et L permettant le calcul de la matrice Hessienne (expression (2.67)) dépendent des dérivées premières et des dérivées secondes du χ^2 (expression (2.64) et (2.65)) par rapport aux paramètres. Certains traitements classiques ignorent les dérivées secondes sans toujours justifier cette approximation. Nous nous placerons également dans ce cas après quelques explications.

Le terme dérivée seconde peut être écarté lorsqu'il est nul (cas de dépendance linéaire) ou suffisamment petit pour être négligé devant les termes faisant intervenir les dérivées premières. Or le terme multipliant la dérivée seconde est $(y_i - \hat{y}_i)$. Pour un modèle bien adapté, ce terme doit être proche de l'erreur aléatoire sur la mesure en chaque point (de signe quelconque) et doit généralement ne pas être corrélé avec le modèle. Par conséquent, les termes dérivées secondes tendent à s'annuler lorsqu'on somme sur les points de mesures. En outre, il faut remarquer que la présence des termes dérivées secondes peut être déstabilisante si le modèle reproduit mal les points de mesure ou s'il est contaminé par des points aberrants (« outliers ») qui seront difficilement « compensés » par des points avec des écarts de signes opposés.

A la lumière des arguments nous utiliserons donc comme définition des éléments de la matrice Hessienne :

$$D = 2K^T W K \quad (2.72)$$

et nous ré-écrivons l'expression (2.70) sous la forme :

$$\Delta X = (K^T W K)^{-1} (K^T W E) \quad (2.73)$$

Si maintenant l'expression (2.68) est une mauvaise approximation locale de la fonction que l'on cherche à minimiser, la *méthode du gradient de plus forte pente à pas prédéterminé* (*steepest descent method*) consiste à estimer une nouvelle valeur des paramètres recherchés à

partir du vecteur gradient multiplié par un coefficient d'amortissement μ positif et suffisamment petit pour que cette estimation ne donne pas une valeur de X trop éloignée de la solution de départ X^0 soit :

$$\Delta X = -\mu B = -\mu 2K^T W E \quad (2.74)$$

et on détermine de cette façon une nouvelle valeur des paramètres (expression (2.71)).

On considère deux méthodes correspondant aux cas où le modèle représente bien et mal les mesures lorsqu'on utilise un développement à l'ordre 2 de la fonction à minimiser. La méthode de Levenberg-Marquardt permet de réunir ces deux méthodes en une méthode unique. La méthode du gradient de plus forte pente à pas prédéterminé (2.74) est utilisée loin du minimum, laissant graduellement la place à la méthode de la Hessienne inverse (2.73) lorsqu'on s'approche du minimum. Cette méthode est bien sûr itérative et permet de déterminer une solution de proche en proche en modifiant à chaque étape l'importance relative des deux processus permettant la diminution du χ^2 .

Le χ^2 est sans dimension alors que les éléments de B ont la dimension de $1/x_j$ (chaque élément de B peut être de dimension différente). La constante multiplicative μ dans l'équation (2.74) doit par conséquent avoir la dimension de x_j^2 . Ainsi l'inverse des éléments diagonaux de la matrice Hessienne $1/(K^T W K)_{j,j}$ (ayant la dimension de x_j^2) nous permettent d'obtenir une estimation des « bornes » de la constante μ , mais cet intervalle pouvant être non réaliste, on le divise par un facteur λ sans dimension avec la possibilité de prendre ce facteur très inférieur à 1 ce qui permet d'augmenter l'intervalle dans lequel se situe la nouvelle solution. On remplace donc l'équation (2.74) en intégrant le facteur 2 dans le coefficient λ par :

$$\Delta x_j = \frac{1}{\lambda (K^T W K)_{j,j}} (K^T W E)_j \Rightarrow \lambda (K^T W K)_{j,j} \Delta x_j = (K^T W E)_j \quad (2.75)$$

et en notation matricielle, on peut écrire :

$$\gamma I \Delta X = K^T W E \quad (2.76)$$

où I est la matrice unité et γ la matrice dont les éléments sont donnés par :

$$(\gamma)_{j,j} = \lambda (K^T W K)_{j,j} \quad j = 1, np \quad (2.77)$$

$$(\gamma)_{j,k} = 0 \quad j, k = 1, np; j \neq k$$

La relation (2.75) ou (2.76) n'est vraie que si $1/(K^T WK)_{j,j}$ est positif pour tout k , ce qui est vrai vu sa définition (équation (2.63) pour $j = k$ et en négligeant les dérivées secondes).

La méthode de Levenberg-Marquardt réunit les équations (2.76) et (2.73) permettant de déterminer un nouvel incrément ΔX :

$$\Delta X = (K^T WK + \gamma I)^{-1} (K^T WE) \quad (2.78)$$

ce qui revient à définir une nouvelle matrice Hessienne $D' = K^T WK + \gamma I$

Quand λ est très grand, la matrice D' est « forcée » par ses éléments diagonaux et l'équation (2.68) tend à être identique à l'équation (2.76). Au contraire, lorsque λ est proche de zéro, l'équation (2.68) tend à être identique à l'équation (2.73).

Un ensemble de données de départ étant fixé et pour un choix de paramètres X à inverser, le processus d'inversion est itératif suivant l'organigramme de la figure II.11.

Il est nécessaire de fixer un critère pour stopper l'itération car en pratique on n'atteint que rarement l'égalité $\chi^2 = 1$. En fait, le minimum recherché ne correspond qu'à la meilleure estimation statistique des paramètres X et un changement des paramètres qui change le χ^2 d'une quantité très inférieure à 1 est rarement significatif. En pratique nous stopperons le processus itératif lorsque le χ^2 n'aura pas diminué, ni augmenté (à la précision machine près), durant trois itérations successives ce qui se produit en général après 9 itérations.

Lorsqu'un minimum acceptable a été trouvé, on recalcule la matrice Hessienne D' pour $\lambda = 0$, matrice qui, une fois inversée, donne une estimation de la matrice variance-covariance des erreurs sur la détermination des paramètres inversés (les éléments diagonaux de cette matrice correspondant aux variances). On peut alors obtenir un intervalle de confiance (seuil de confiance de 68 %) pour chaque paramètre inversé:

$$\left[x_j - \sqrt{\chi_r^2 (K^T WK)_{jj}^{-1}}, x_j + \sqrt{\chi_r^2 (K^T WK)_{jj}^{-1}} \right] \quad (2.79)$$

où χ_r^2 est le χ^2 réduit (expression (2.36)) et où $(K^T WK)_{jj}^{-1}$ est le $j^{\text{ème}}$ élément diagonal de la matrice Hessienne inverse.

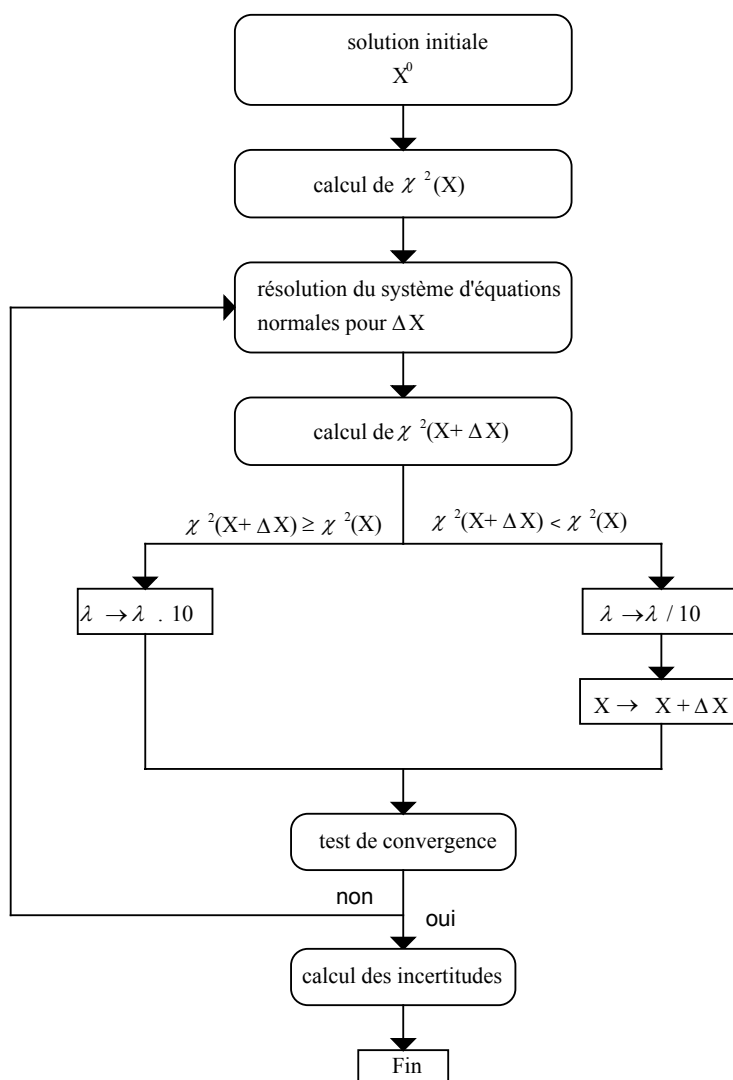


Figure II.11 : Organigramme de l'algorithme d'inversion de Levenberg-Marquardt.

II.4.4 L'information *a priori*

Jusqu'alors, dans tout le processus de calcul, aucune contrainte sur la réalité physique des solutions n'est prise en compte durant l'inversion. Il se peut donc que la solution déterminée par l'algorithme de Levenberg-Marquardt corresponde effectivement à un minimum de la fonction de coût mais n'ait aucune réalité physique. On introduit donc une contrainte supplémentaire pour prendre en compte la cohérence des solutions trouvées, via une information *a priori* sur les paramètres recherchés.

L'information *a priori* peut, par exemple, être le profil vertical de concentration d'une espèce chimique qu'on souhaite mesurer. En général, elle correspond à l'état de l'atmosphère, connu, avant la mesure [ROD00]. Le profil *a priori* peut être utilisé pour plus de simplicité comme profil de départ (*first guess* dans [ROD00]) mais ce n'est pas une obligation.

Cette contrainte supplémentaire est rajoutée à la fonction de coût définie précédemment (2.58) mais $\Delta X = x - x_0$ devient $x - x_a$ où x_a est le vecteur des valeurs *a priori* des paramètres recherchés (avant la mesure), c'est aussi une solution de départ qui a un sens physique. On peut aussi introduire l'inverse de la matrice erreur, S_e^{-1} qui dans notre cas est une matrice diagonale et dont les valeurs correspondent aux éléments diagonaux w_i . On a ainsi :

$$Z = E^T S_e^{-1} E + \lambda (x - x_a)^T S_a^{-1} (x - x_a) \quad (2.80)$$

S_a est une estimation *a priori* de la matrice variance-covariance des paramètres. Nous l'avons supposée diagonale pour simplifier. On pénalise ainsi au cours du processus itératif les variations trop importantes des paramètres par rapport à la solution *a priori* en tenant compte des « fluctuations » acceptables autour de cette solution en fonction des erreurs également estimées *a priori*, les éléments diagonaux de la matrice variance-covariance donnant une estimation statistique de l'erreur sur la détermination *a priori* des paramètres.

Combiné avec la méthode du gradient de plus forte pente à pas déterminé (comme dans la méthode de Levenberg-Marquardt décrite ci-dessus) l'incrément d'itération a pour nouvelle expression:

$$\Delta X = (K^T S_e^{-1} K + S_a^{-1} + \mathcal{M})^{-1} ((K^T S_e^{-1} E) - S_a^{-1} (x - x_a)) \quad (2.81)$$

On obtient ainsi une nouvelle expression de (2.79) pour chaque paramètre inversé qui tient compte de l'information *a priori* et qui contraint la solution dans un domaine de validité physique.

$$\left[x_j - \sqrt{\chi_r^2 (K^T S_e^{-1} K + S_a^{-1})_{jj}^{-1}}, x_j + \sqrt{\chi_r^2 (K^T S_e^{-1} K + S_a^{-1})_{jj}^{-1}} \right] \quad (2.82)$$

II.5 Méthodologie de l'inversion d'un profil à partir d'un spectre IASI-ballon

Dans cette sous-partie nous nous proposons de synthétiser le processus d'inversion des spectres infrarouges et de décrire le cheminement allant des données de départ jusqu'à l'ajustement du spectre et la restitution des paramètres inversés.

Pour reprendre de manière schématique l'ajustement d'un spectre infrarouge en visée verticale ainsi que la méthode inversion permettant d'obtenir les profils ou colonnes des constituants atmosphériques, la figure II.12 présente les grandes étapes décrites au chapitre II. Tout le programme d'ajustement des spectres s'articule autour de l'algorithme de Levenberg-Marquardt (partie en vert). En plus du spectre, l'utilisateur doit fournir en entrée, un profil vertical de pression et de température obtenus par sondage lors du vol. Cette connaissance du profil thermodynamique est nécessaire ainsi que la position de l'instrument pour définir la ligne de visée de la scène observée. Il faut aussi fournir en entrée des profils de départ des espèces qui seront ajustés. Ces profils proviennent généralement de données standard AFGL [AND86] mis à jour qui utilisent des données moyennées de type climatologique et de modèles de chimie atmosphérique pour prendre en compte les variations saisonnières.

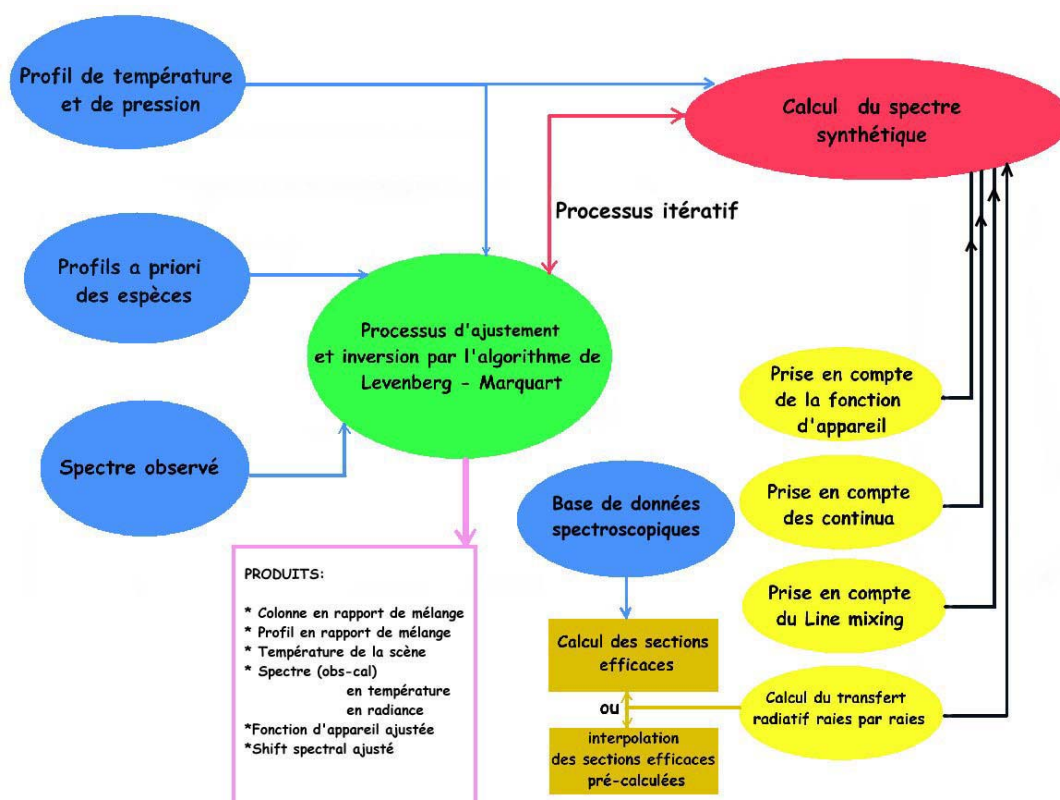


Figure II.12 : Schéma résumant les processus entrant en jeu lors des traitements et inversions des spectres infrarouges.

Une fois que toutes ces données sont prises en compte (partie en bleu), on effectue un premier calcul de spectre synthétique ce qui nous fournit une première valeur du χ^2 . A chaque itération de l'algorithme d'ajustement on compare le spectre calculé par le modèle direct au spectre observé jusqu'à obtenir une valeur de χ^2 satisfaisant le critère de convergence. Sur la figure II.12 on rappelle pour le calcul du spectre synthétique (en rouge) les étapes importantes

de la simulation (en jaune) : la prise en compte des effets instrumentaux (*cf. II.3.4*), le continuum de la vapeur d'eau, le spectre de N₂ et de O₂ induit par collisions (*cf. II.3.2*) et lorsqu'on considère une micro-fenêtre où il y a la présence de branches *Q* de CO₂ on prend en compte le « line-mixing » (*cf. II.3.3*) ; et enfin le calcul de transfert radiatif raie par raie avec le flux descendant et le flux réfléchi (*cf. II.2.1 et II.2.2*).

Lors du calcul des sections efficaces (*cf. II.2.3*), le choix est possible entre plusieurs banques de données spectroscopiques : HITRAN 2000, GEISA, MIPAS ou de sections efficaces déterminées semi-empiriquement. Mais si des sections efficaces pré-calculées sont disponibles du fait d'un calcul antérieur, il sera rapide d'effectuer l'interpolation des coefficients d'absorption à partir de ces sections efficaces pré-calculées.

Une fois que le critère de convergence est satisfait, on restitue les profils verticaux ou les colonnes des espèces chimiques. Parmi les paramètres qu'il est possible d'ajuster, on peut considérer jusqu'à six paramètres (a_1 , a_2 , r_1 , r_2 , m_1 , m_2) relatifs à la fonction d'appareil, car celle-ci peut varier en cours d'un vol. Nous tenons compte des fluctuations de la température de la scène observée ainsi que de l'émissivité propre de la surface. Pour des raisons pratiques l'émissivité est généralement fixée à 1 et la température de la scène est ajustée ou inversement. Pour l'ajustement des espèces atmosphériques via les profils verticaux de rapport de mélange, deux choix sont possibles. Soit on ajuste la colonne dans sa totalité en conservant la forme du profil, soit on ajuste le profil lui-même. Il faut noter qu'il n'est pas toujours possible d'ajuster le profil du fait que la signature spectrale de l'espèce chimique considérée ne contient pas une information suffisante pour qu'on puisse restituer le profil aux différentes altitudes.

Lors de l'ajustement de la colonne, c'est un coefficient multiplicateur du profil initialement introduit qui est optimisé dans le modèle d'inversion. Ce coefficient multiplicateur revient à effectuer une homothétie du profil, en rapport de mélange, et donc à faire varier la quantité totale de molécules d'une espèce c'est-à-dire la colonne totale. Lors de l'ajustement d'un profil on doit donner une certaine « souplesse » au profil de départ. Pour cela on indique au programme que les valeurs du rapport de mélange à certaines altitudes du profil deviennent des paramètres ajustables. Ces altitudes sont ce qu'on appelle les niveaux de restitution du profil. Lors de l'ajustement du spectre, le profil varie différemment en fonction des niveaux des restitutions. En partant de l'altitude zéro vers le plafond : entre la surface et le premier niveau de restitution le « morceau » de profil est multiplié par la même valeur que celle obtenue pour le premier niveau de restitution ajusté. Entre deux niveaux de restitution le profil est multiplié par une valeur interpolée linéairement entre les niveaux ajustés, enfin entre le dernier niveau et le plafond, on multiplie le profil par le coefficient ajusté du dernier niveau de restitution.

En tout, avec les paramètres de la fonction d'appareil, la température de surface ou l'émissivité et les paramètres des colonnes (ou des profils) pour chaque espèce chimique, il est possible d'effectuer l'inversion de 30 paramètres.

Par la suite nous allons illustrer ce processus de traitement des spectres infrarouges avec les données du vol ballon IASI02 qui nous a permis d'affiner notre connaissance sur la distribution des espèces O_3 , CH_4 , N_2O , CO . Le but étant de déterminer la composition quantitative d'espèces chimiques dans la troposphère et la basse stratosphère à travers un modèle physique déterministe de transfert radiatif.

Opérations de lancement pour le vol ballon IASI02. (photo LPMA/CNRS)



CHAPITRE III

Inversion de l'ozone

Dans le chapitre précédent nous avons introduit la méthodologie qui permet à partir d'un spectre atmosphérique en émission dans infrarouge thermique de remonter à l'information sur la colonne totale ou/et le profil vertical d'une espèce chimique donnée. Dans ce chapitre nous allons appliquer cette méthode d'inversion des spectres pour déterminer les profils d'ozone. Nous nous intéresserons particulièrement à la sensibilité des ajustements des spectres aux différents paramètres perturbateurs et à la qualité de nos inversions. De nombreux aspects sont à considérer lors des inversions des spectres, notamment la prise en compte de la variabilité géographique lors de l'acquisition des spectres infrarouges.

Pour caractériser la sensibilité de l'inversion du profil d'ozone avec notre modèle, différents outils statistiques ont été mis en place comme la détermination du nombre de degrés de liberté ou le calcul de l'entropie informationnelle afin d'obtenir une plus grande confiance dans le profil inversé. Nous nous intéresserons aux paramètres susceptibles d'améliorer la détermination des profils.

III.1 L'acquisition des spectres IASI02

III.1.1 Profil du vol IASI02

Le second vol ballon du LPMA (IASI02) a eu lieu le 5 août 2002 à partir de la base d'Estrange près de Kiruna (Suède). Le vol a débuté vers 18h03 Temps Universel (UT) et la nacelle a terminé sa descente sous parachute après séparation du ballon vers 22h35 (UT). Les spectres que nous avons traités ont été pris en compte à partir du moment où le ballon avait atteint son altitude de plafond, c'est-à-dire autour de 30 - 32 km d'altitude. Comme le montre la figure III.1 l'altitude de 30 km n'est pas atteinte tout de suite, mais en un peu plus d'une heure. Pour origine des temps, nous avons considéré (abscisse des figures III.1 et III.2) le moment du lancement de la nacelle c'est-à-dire 18h30 (UT). Tous les temps d'enregistrement des spectres (et leur chronologie) sont déterminés à partir de ce temps de référence.

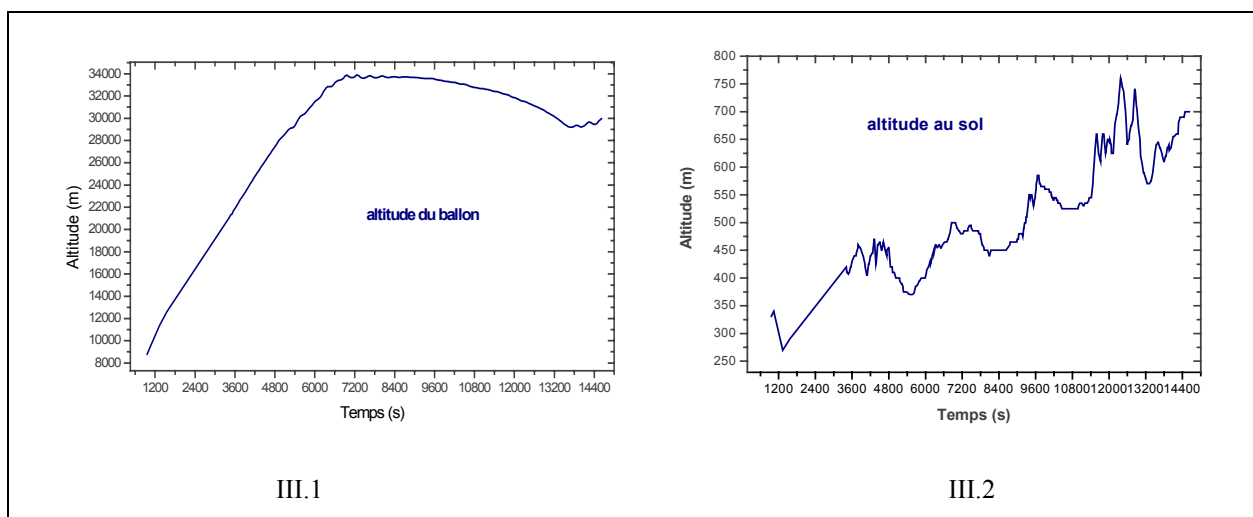


Figure III.1 et III.2 : Profil du vol IASI02 en fonction de l'altitude du ballon en fonction du temps de vol (figure de gauche) et en fonction de l'altitude du relief survolé par le ballon. (figure de droite)

Le système GPS embarqué et une carte topographique de la région permettent de déterminer le profil d'altitude du relief survolé par le ballon pendant la durée de l'expérience

avec une précision relative de 10 m (*Fig. III.2*). Une connaissance de l'altitude du ballon et de l'altitude du relief survolé, rend possible la caractérisation, avec une bonne précision, de l'épaisseur de la colonne de gaz que l'on sonde, donnée importante pour l'équation du transfert radiatif. Cette caractérisation de la scène est une des étapes importantes avant le traitement proprement dit des spectres. En effet la région de Kiruna possède de nombreux petits lacs (*Fig. III.3*), l'instrument est donc susceptible d'enregistrer un spectre en visant un des lacs. La conséquence est que l'émissivité n'étant pas la même que sur une surface solide, la scène sera vue à travers les spectres comme beaucoup plus chaude. Ce genre de détails introduit des variations d'un spectre à l'autre qui ne sont pas toujours facilement décelables et explicables sans ce pré-traitement des scènes survolées. Ce pré-traitement est réalisé grâce aux données auxiliaires acquises par l'imageur infrarouge et la caméra CCD visible.

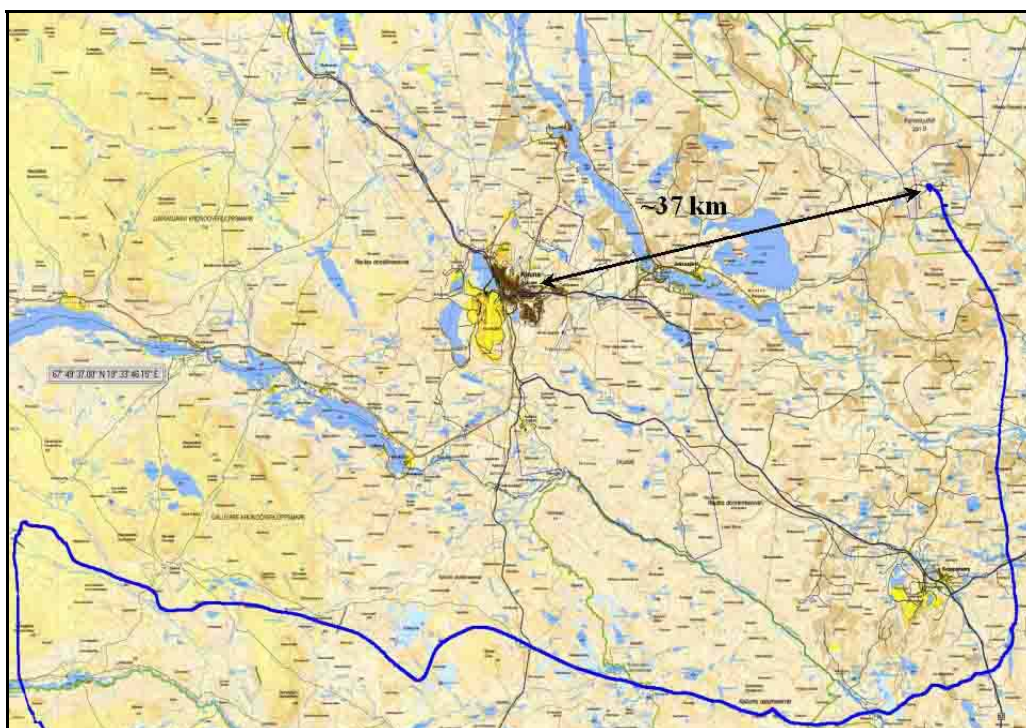


Figure III.3: Carte topographique de la région de Kiruna (la ville de Kiruna au centre de la carte) au nord de la Suède. En bleu le tracé du parcours de l'expérience IASI02 à partir de la base d'Esrange (en haut à droite).

D'un point de vue géographique la zone survolée par le ballon reste assez localisée et les mesures se sont déroulées sur un laps de temps relativement court. On doit donc s'attendre à ce que les résultats qui sont fonction de la variabilité temporelle et géographique ne soient pas trop dispersés. Les fortes fluctuations pourront être imputables à d'autres phénomènes que la variation journalière (assez faible en été aux hautes latitudes) ou qu'aux différences géographiques.

III.1.2 Conditions météorologiques lors de d'enregistrement des spectres

Pour effectuer un traitement des spectres il nous faut déterminer à la fois la géométrie de la visée et le profil de température et de pression pour chaque spectre tout au long du vol (Fig. III.4). Pour cela, des sondages sont effectués avant, pendant et après le vol par la station météo de Kiruna. Il faut ensuite, en fonction de l'altitude du sol et de celle du ballon, effectuer une interpolation linéaire en température et logarithmique pour la densité moléculaire et la pression à partir des sondages fournis. On remarque sur les profils verticaux de la température que la variabilité temporelle n'est pas très importante, il est donc raisonnable d'effectuer cette hypothèse d'interpolation des températures en fonction du temps d'acquisition de chaque spectre. On peut faire la même remarque au sujet de la pression ou de la densité moléculaire quand la situation météo reste relativement stable.

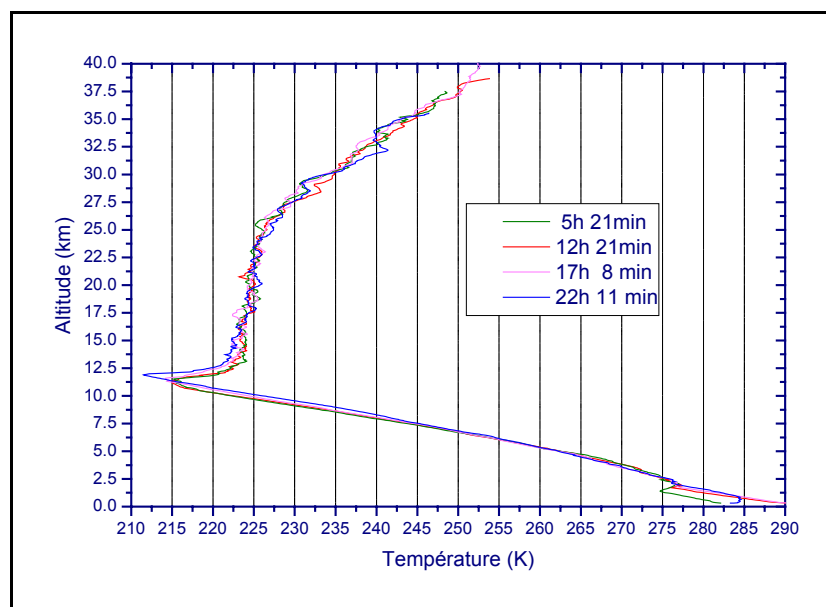


Figure III.4: Profil vertical de la température à différentes heures le jour du vol de IASI02.

Au cours du vol IASI02, 227 spectres ont pu être enregistrés. Tous ne permettent pas d'effectuer un sondage de la troposphère et de la basse troposphère, car une partie des enregistrements ont été effectués lors de l'ascension de l'instrument. Un autre problème ne permettant pas le traitement immédiat des spectres dans l'infrarouge thermique est la couverture nuageuse. En présence de nuages dans la scène visée il est difficile de connaître l'altitude de la surface visée. Si le nuage est dense il s'agit de l'altitude du sommet du nuage

qu'il faut encore déterminer, et si le nuage est en partie transparent on peut viser la surface mais la contribution spectrale du nuage reste difficile à quantifier.

Afin d'effectuer un suivi de la couverture nuageuse durant le vol, l'expérience IASI-ballon (à partir du second vol uniquement) à été munie d'une caméra infrarouge. Grâce à cet instrument supplémentaire, il nous est possible de suivre l'évolution de l'environnement sondé. Avec les figures III.5 et III.6 on trouve un exemple d'images obtenues à partir de la caméra infrarouge. Ces images sont prises et enregistrées à des intervalles de temps déterminés de manière à les faire coïncider avec le temps d'enregistrement des spectres correspondants. Il est ainsi possible de savoir si un nuage rentrant dans le champ de vue de la caméra, (apparaissant plus froid sur les images), est ou non dans le champ de vue instantané (IFOV) de l'interféromètre.

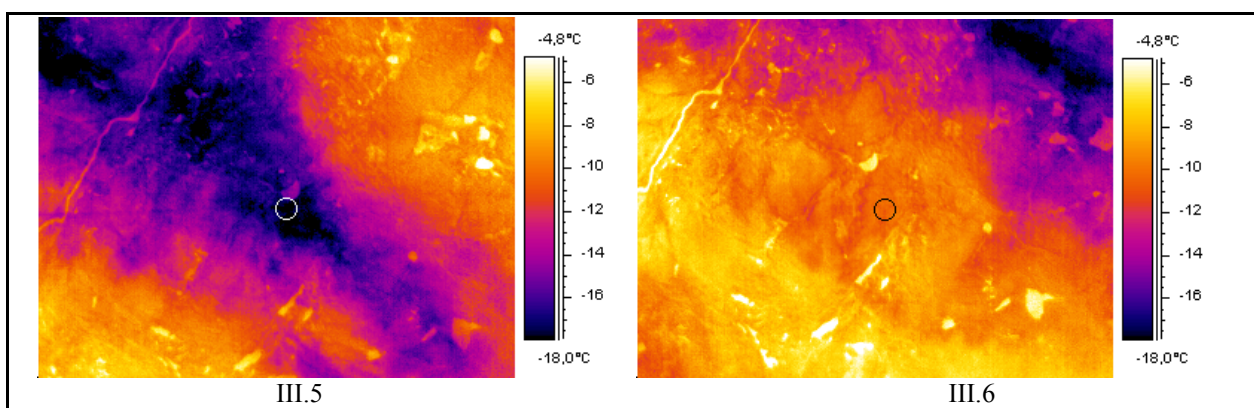


Figure III.5 et III.6 : Images obtenues au cours du vol IASI02 par la caméra infrarouge. Les couleurs sombres représentent les températures les plus froides et les couleurs claires les températures les plus chaudes de l'image. On observe ici le passage, sur une même scène, d'un nuage (bande en violet). L'échelle de température est relative à la température la plus chaude. Le cercle au centre de l'image représente le champ de vue instantané (IFOV) visé par l'instrument TF embarqué.

La nature de la surface que l'on vise joue, elle aussi, un rôle important notamment sur la température de brillance du fond des spectres en émission infrarouge. Celle-ci est déterminée (Fig. III.7) en considérant plusieurs micro-fenêtres ne contenant pas de raie spectrale et en prenant la fonction inverse de la fonction du corps noir (cf. (1.22)). En effectuant cette opération sur tous les spectres de IASI02 on peut déceler la présence de nuages car les spectres apparaissent alors beaucoup plus froids. En parallèle avec les images de la caméra infrarouge on peut donc confirmer la présence de nuages par la caractéristique des spectres enregistrés. Une partie des spectres a été obtenue en visée horizontale (visée au limbe) Ces spectres n'apparaissent pas sur la figure III.7 (aux temps 9 000 et 10 000 s). Ils requièrent un traitement différent de par leur géométrie, de plus ils ne permettent pas d'effectuer un sondage de la troposphère. Les spectres au limbe ne sont pas traités ici, mais on mentionnera tout de même le

lien avec l'expérience MIPAS embarqué sur la plate-forme ENVISAT [CAM04] qui réalise des observations dans la même géométrie et dans le même domaine spectral.

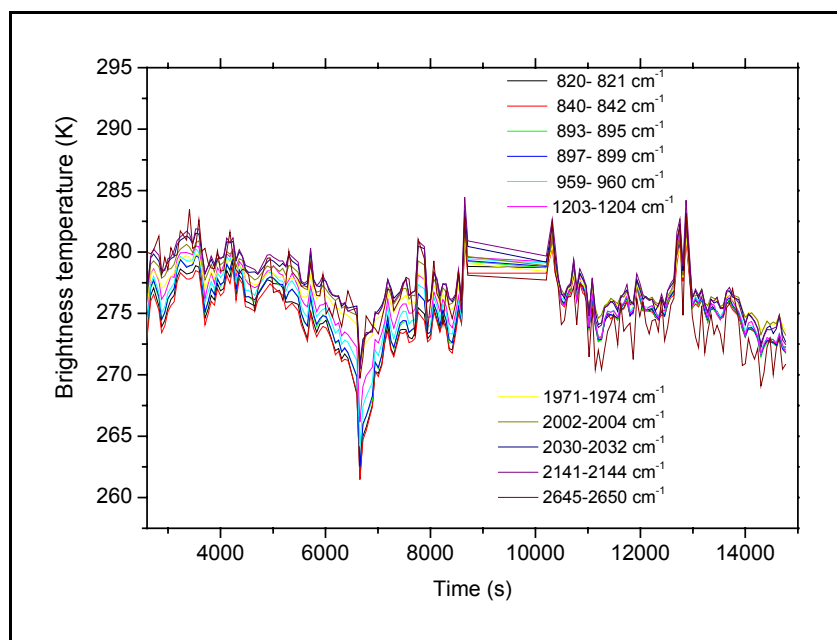


Figure III.7 : Température de brillance des scènes atmosphériques durant le vol obtenues en prenant la fonction inverse du corps noir pour différentes micro-fenêtres transparentes dans tout le domaine spectral des détecteurs.

Ce travail préliminaire de sélection des spectres avant l'inversion et d'attribution, pour chaque spectre, d'une géométrie et d'un profil de température et de pression bien définis permet de comprendre certaines variations observées d'un spectre à l'autre. En effet, si sur une série de spectres infrarouges enregistrés un spectre plus froid que les autres spectres apparaît lors de l'inversion on peut supposer que soit un nuage est venu perturber la mesure, soit que le relief a sensiblement changé. Pour cela la détermination de la géométrie de la ligne de visée joue un rôle important. A cela on peut ajouter qu'à partir des spectres nous n'effectuons pas de détermination indépendante de température des couches d'air que l'on sonde et donc qu'une détermination à partir des sondages et de la géométrie est nécessaire pour prendre en compte les contributions de chaque couche atmosphérique dans le calcul des profils des raies.

Sur la totalité des spectres qui ont été enregistrés nous avons finalement sélectionné 109 spectres pour effectuer l'inversion des profils verticaux des espèces chimiques. Ces spectres concernent le milieu et la fin de vol du ballon, ce qui correspond aux spectres enregistrés pour les temps au-delà de 7 000 s durant le vol (*Fig. III.3* et *Fig. III.4*).

III.2 Base de données spectroscopiques pour l'ajustement des spectres infrarouges en émission thermique.

III.2.1 Fenêtre spectrale pour l'étude des profils d'ozone

Pour des raisons de puissance de calcul, il est difficile d'effectuer l'inversion d'un spectre dans sa totalité. On doit procéder à un découpage de manière à avoir une fenêtre spectrale relativement étroite ou micro-fenêtre qui permette d'inverser les espèces chimiques sélectionnées et cela sans temps de calcul prohibitif. Pour l'étude sur l'inversion du profil d'ozone nous avons choisi la fenêtre autour de $10 \mu\text{m}$ ($950 - 1100 \text{ cm}^{-1}$) correspondant aux bandes ν_3 et ν_1 de l'ozone. Ce domaine spectral est communément utilisé pour l'étude de l'ozone atmosphérique à partir des spectres infrarouges. D'autres espèces chimiques sont aussi actives dans cette fenêtre mais de manière moins importante (*Tab. III.1*). Il faut tout de même noter la présence de raies de vapeur d'eau (H_2O) et de bandes du dioxyde de carbone (CO_2) (*Fig. III.8*) avec des intensités relativement importantes. Mais pour le CO_2 les bandes sont assez bien localisées et ne recouvrent que partiellement le domaine des raies de l'ozone. Dans les 2 cas (H_2O et CO_2) ont distingue facilement les espèces perturbatrices par rapport à l'espèce à laquelle on s'intéresse (O_3).

Espèce chimique	CH_4	N_2O	CO_2	H_2O	O_3
Numéro de référence de l'espèce chimique dans HITRAN	6	4	2	1	3
Bandes présentes dans la fenêtre $950-1100 \text{ cm}^{-1}$	ν_4 , $2\nu_4 - \nu_2$	$\nu_3 - \nu_1$, $\nu_3 - 2\nu_2$	$(\nu_3 - \nu_1)_I$, $(\nu_3 - \nu_1)_{II}$	ν_2	ν_3, ν_1 , $2\nu_3 - \nu_3$, $\nu_1 + \nu_3 - \nu_1$, $\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$

Tableau III.1: Espèces chimiques présentes dans la micro-fenêtre $950 - 1100 \text{ cm}^{-1}$.

Dans le cas de la vapeur d'eau les raies ne sont pas aussi régulièrement distribuées que pour les bandes de CO_2 . Les intensités des raies sont importantes et apparaissent bien dans les spectres. Le principal problème vient des raies vers $1060 - 1070 \text{ cm}^{-1}$. Ces raies de H_2O se situent souvent au voisinage de raies d'ozone qui ont à peu près la même amplitude dans le spectre ce qui pose un problème pour l'ajustement. Pour une signature spectrale « mélangée » il est difficile d'attribuer la contribution principale à l'une ou à l'autre des deux espèces. Pour

résoudre ce problème on joue sur la taille de la fenêtre retenue pour l'ajustement et sur le nombre important de raies d'ozone. On obtient ainsi des profils qui sont issus de l'ajustement de toutes les raies d'ozone présentes dans la fenêtre spectrale utilisée. On peut dire que le poids des raies de H_2O entre $1060 - 1070 \text{ cm}^{-1}$ dans la restitution du profil d'ozone est petit vu le nombre important de raies d'ozone considérées. Le fait que des raies d'espèces différentes se recouvrent, comme dans le cas de H_2O et CO_2 avec l'ozone dans la fenêtre $950 - 1100 \text{ cm}^{-1}$ n'a pas trop d'impact sur l'inversion si ce recouvrement n'est que local et si on a par ailleurs un nombre important de raies pouvant apporter de l'information utile sur le profil de l'espèce qu'on souhaite restituer.

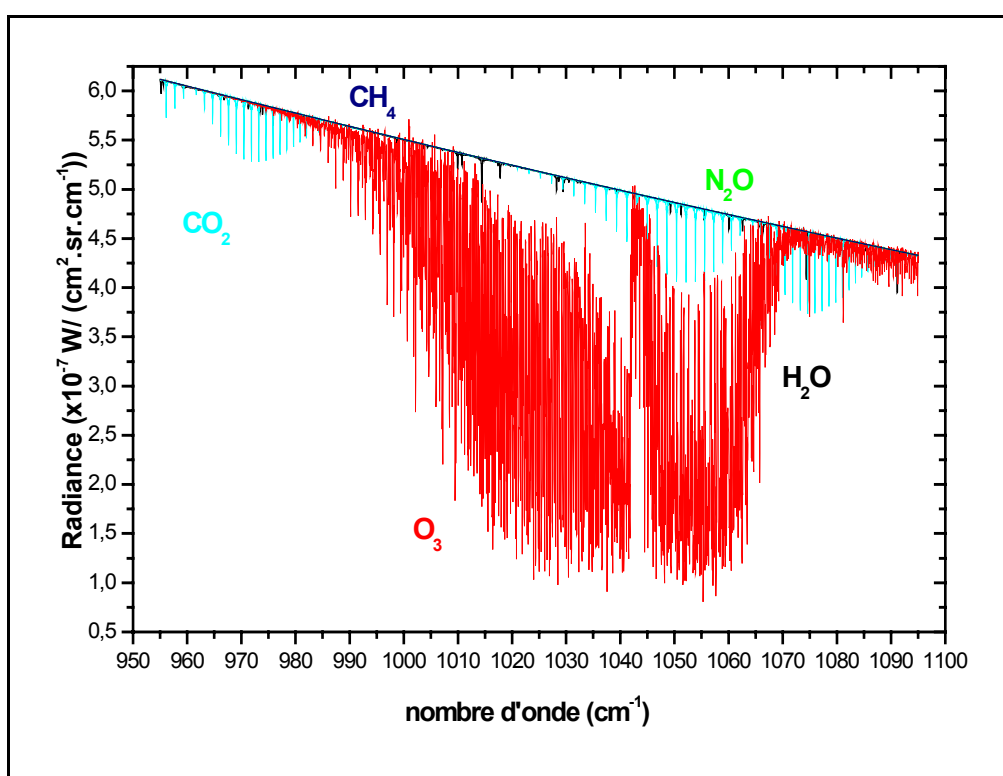


Figure III.8 : Contributions spectrales des différentes espèces présentes dans la fenêtre $950-1100 \text{ cm}^{-1}$ pour un spectre atmosphérique en émission thermique en visée vers le bas (calcul direct).

Le méthane (CH_4) et protoxyde d'azote (N_2O) sont présents dans cette fenêtre mais l'intensité des raies correspondantes est plutôt faible et leurs contributions sont du même ordre que le bruit du spectre. Ces espèces ont bien sûr été conservées dans les calculs, mais leur faible contribution aux spectres ne permet pas de déterminer une colonne pour ces espèces par l'inversion dans cette fenêtre seule.

La molécule OCS pourrait aussi contribuer dans la région étudiée mais l'intensité des raies correspondantes est toujours plus faible que la contribution du bruit lors de l'enregistrement des spectres. Le fait de prendre en considération OCS dans la simulation des

spectres et dans leur ajustement n'a apporté aucune amélioration dans le résidu des spectres. Pour un gain de temps calcul, on a donc préféré ne pas prendre en compte OCS même si des raies de cette espèce sont en principe présentes dans ce domaine spectral.

III.2.2 Impact du choix de la base spectroscopique sur l'ajustement

Les inversions des spectres infrarouges en visée au nadir du vol IASI02 dans la région à 10 μm ont été effectuées dans un premier temps en utilisant la base de données spectroscopique HITRAN 2000 [ROT92], [ROT98]. Les résultats des ajustements des spectres montrent qu'on arrive relativement bien à reproduire les spectres mesurés par le calcul avec le code de transfert radiatif LARA (Fig. III.10). Les résidus en radiance (Fig. III.12) et en température de brillance (Fig. III.14), après ajustement, ne montrent pas de corrélation avec les raies. Le résidu en température de brillance montre que celui-ci est inférieur à un Kelvin pour les régions du spectre où on a une faible densité de raies d'ozone et environ 2 K au niveau des fortes raies de l'ozone. Si on compare les résidus en radiance au bruit radiométrique estimé dans les spectres ($5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$ environ), on constate que celui-ci est voisin des valeurs obtenues dans la figure III.12. On estime que les ajustements des 109 spectres sont de qualité égale et qu'ils sont satisfaisants. Les résidus obtenus sont ce que l'on peut obtenir de mieux compte tenu du bruit des spectres. On observe tout de même dans les résidus une différence significative (résidus plus importants) au niveau des fortes absorptions de l'ozone. Les résidus en radiance ou en température de brillance adoptent « une forme » que l'on peut retrouver dans le spectre lui-même. Cela montre que le code de transfert radiatif a des difficultés à reproduire la bande de l'ozone dans sa totalité à partir des informations qu'on lui donne en entrée. Cette forme du résidu se retrouve dans toutes les simulations qui ont été faites lors du premier exercice d'intercomparaison d'algorithme de calcul de spectre raie par raie (LIE) [TJE03]. Parmi les explications données on a proposé l'existence d'un effet de line-mixing pour l'ozone. Un problème au niveau du découpage vertical (layering) des couches atmosphériques a également été suggéré. La solution serait alors d'avoir une meilleure précision sur les variations verticales du profil avec un découpage plus fin. Du point de vue de la base spectroscopique le nombre insuffisant de raies ou un critère de coupure trop sévère ou bien la non-considération des bandes chaudes de l'ozone peuvent être aussi une des causes de cette forme de résidu.

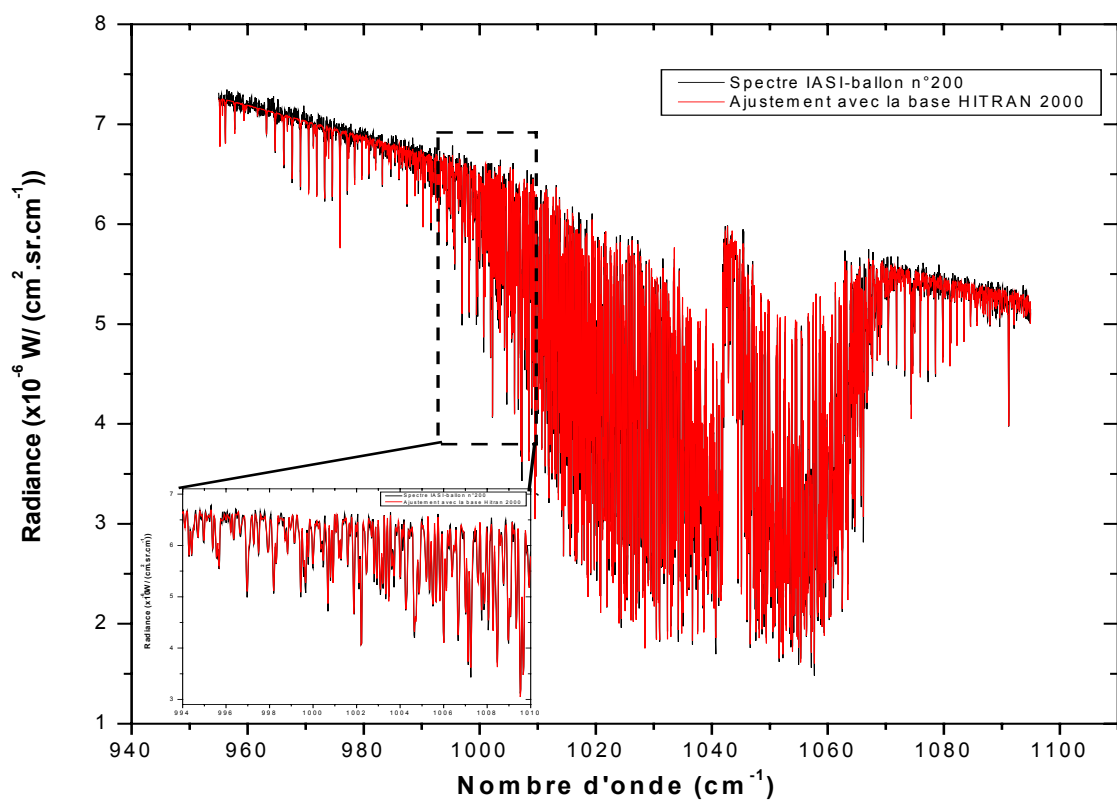
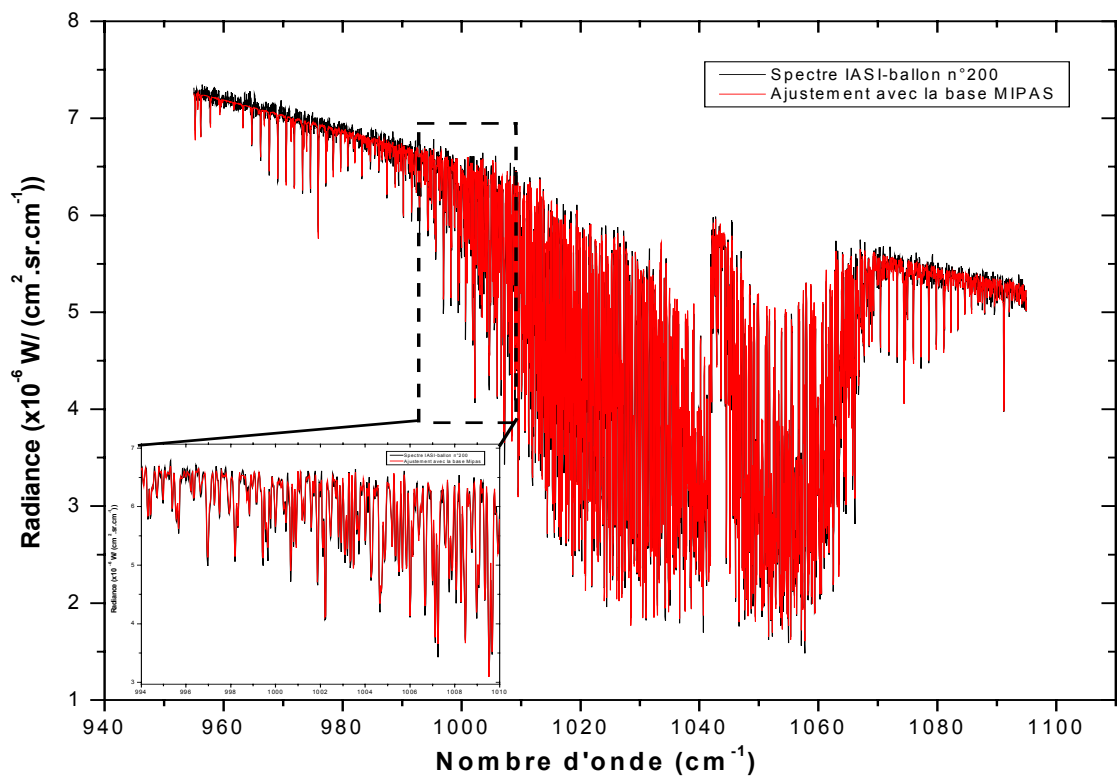


Figure III.9 et III.10 : Exemples d'ajustements de spectre IASI-ballon (vol IASIO2) en utilisant les bases spectroscopiques HITRAN et MIPAS pour le calcul des sections efficaces de l'ozone.

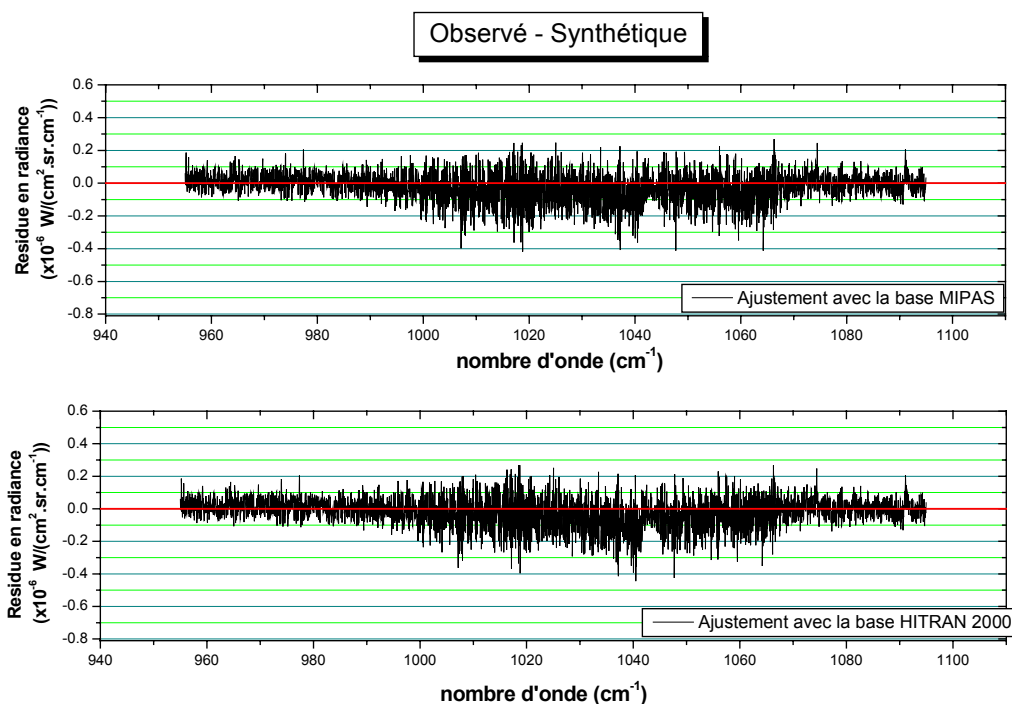


Figure III.11 et III.12: Comparaison entre la différence du spectre observe IASI-ballon (vol IASI02) et du spectre calculé en radiance en utilisant pour les sections efficaces de l'ozone les bases spectroscopiques HITRAN 2000 et MIPAS.

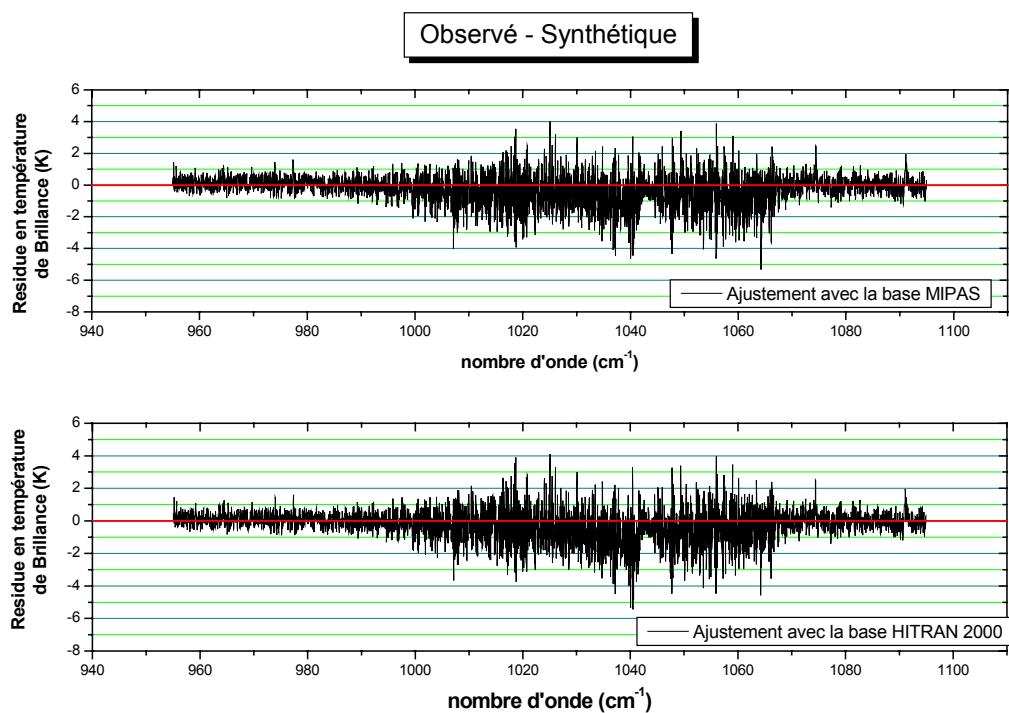


Figure III.13 et III.14: Comparaison entre la différence du spectre observé IASI-ballon (vol IASI02) et du spectre calculé en température de brillance en utilisant pour les sections efficaces de l'ozone les bases spectroscopiques HITRAN 2000 et MIPAS.

Nous nous sommes intéressés à une seconde base de données spectroscopiques pour l'ozone afin de voir si la base HITRAN 2000 était suffisamment fiable et de vérifier que le résidu pouvait être réduit en utilisant une base de données fournissant un nombre beaucoup plus grand de raies. Nous avons repris les ajustements de tous les spectres, mais cette fois ci en utilisant pour l'ozone la base spectroscopique développée pour MIPAS. La première comparaison entre les bases de MIPAS et HITRAN montre qu'il y a beaucoup plus de raies répertoriées dans la base MIPAS. Ces raies supplémentaires proviennent du fait que la base de MIPAS considère des transitions de bandes chaudes de l'ozone non présentes dans HITRAN 2000 (l'objectif étant de pouvoir traiter les effets de non-équilibre thermodynamique local pour O_3). On a ainsi pour la région entre $950-1100\text{ cm}^{-1}$ 44 166 raies pour HITRAN et 160 538 raies pour MIPAS. Dans la base MIPAS les intensités sont données avec un seuil très bas de $10^{-34}\text{ cm}^2/\text{molécule}$, ce qui accroît considérablement le nombre de raies par rapport à HITRAN.

En effectuant l'ajustement des spectres en utilisant la base MIPAS pour l'ozone, on observe un très bon accord entre spectres observés et spectres calculés (*Fig. III.9*). En comparant les résidus en radiance et en température de brillance on peut observer une légère amélioration de ceux-ci avec l'emploi de la base spectroscopique MIPAS.

Un léger « recentrage » autour de zéro est observé sur les résidus avec la banque MIPAS. Autour de 1040 cm^{-1} là où l'intensité du résidu est la plus importante on constate une diminution allant jusqu'à 1 K. Autour de $950 - 980\text{ cm}^{-1}$ une amélioration du résidu ne se fait pas de manière significative ce qui montre que l'amélioration imputable au changement effectué au niveau des bases spectroscopiques de l'ozone uniquement ne résout pas tous les problèmes.

La figure III.15 montre la différence entre les spectres calculés en température de brillance obtenus après ajustement. On observe, suivant la région spectrale, que les bases spectroscopiques MIPAS et HITRAN ne compensent pas les différences systématiques de la même manière. Ceci met en évidence le fait qu'il soit difficile de choisir une base plutôt qu'une autre étant donné que l'amélioration apportée sur le résidu n'est pas répartie de la même manière suivant la région spectrale considérée. Pour la région entre 1020 et 1050 cm^{-1} , on constate en observant les résidus (*Fig. III.13* et *Fig. III.14*) que l'amélioration est claire avec la base MIPAS, mais que dans les autres régions (entre 950 et 1020 cm^{-1} et entre 1050 et 1070 cm^{-1}) où les résidus sont les plus importants, la base MIPAS semble moins bonne que la base HITRAN. En fait nous considérerons que la base MIPAS améliore globalement l'ajustement des spectres du fait qu'elle corrige ainsi légèrement la forme systématique du résidu observé lors des ajustements avec HITRAN. Mais on ne peut pas affirmer que le résidu ayant la forme

de la bande de l'ozone résulte de la non prise en compte de raies dans HITRAN 2000 (par rapport à MIPAS). On améliore le résidu en utilisant la base MIPAS, mais des résidus subsistent. L'existence de « line-mixing » pour l'ozone reste encore une possibilité, mais elle est difficile à vérifier faute de données permettant de modéliser l'effet de « line-mixing » de l'ozone dans cette région.

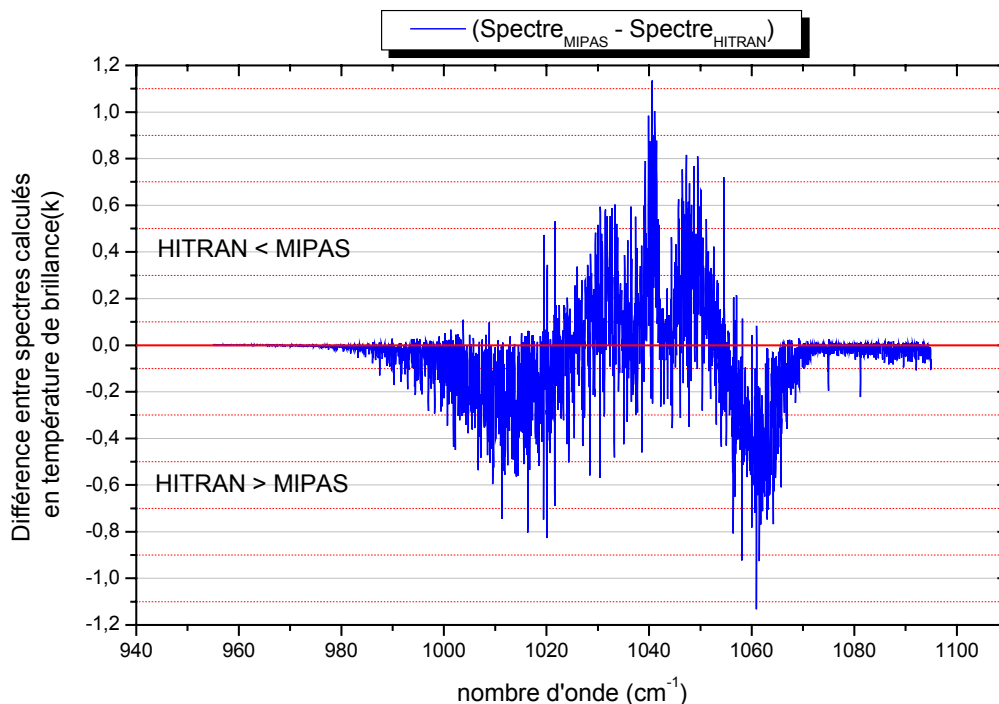


Figure III.15 : Différence entre spectres obtenus après ajustement en utilisant avec les bases spectroscopiques HITRAN et MIPAS

Un des points qu'il faut noter est l'impact du changement de base spectroscopique sur l'inversion et notamment sur la restitution des profils verticaux d'ozone. En comparant les sections efficaces calculées pour une température et une pression donnée (Fig. III.16 et Fig. III.17), on peut observer que les raies sont moins intenses avec la base MIPAS. Une comparaison des bases montre, pour des raies communes aux deux bases, que les sections efficaces pour MIPAS sont en moyenne de 4 % inférieures à celle de HITRAN. Cela a pour conséquence que pour une raie observée dans les spectres IASI02, le profil que l'on restituera en utilisant la base MIPAS, conduira à plus de molécules d'ozone. Du point de vue des positions des raies on constate de léger décalage de l'ordre du 1/1000 de cm^{-1} . Etant donnée la résolution des spectres IASI02 ($0,25 \text{ cm}^{-1}$) et le grand nombre de raies d'ozone dans un si petit intervalle, il est difficile de quantifier l'impact de ce faible décalage. On estime que ce décalage des positions de raies entre HITRAN et MIPAS n'a pas de conséquences ni au

niveau de la qualité de l'ajustement des spectres ni au niveau de la restitution des profils verticaux.

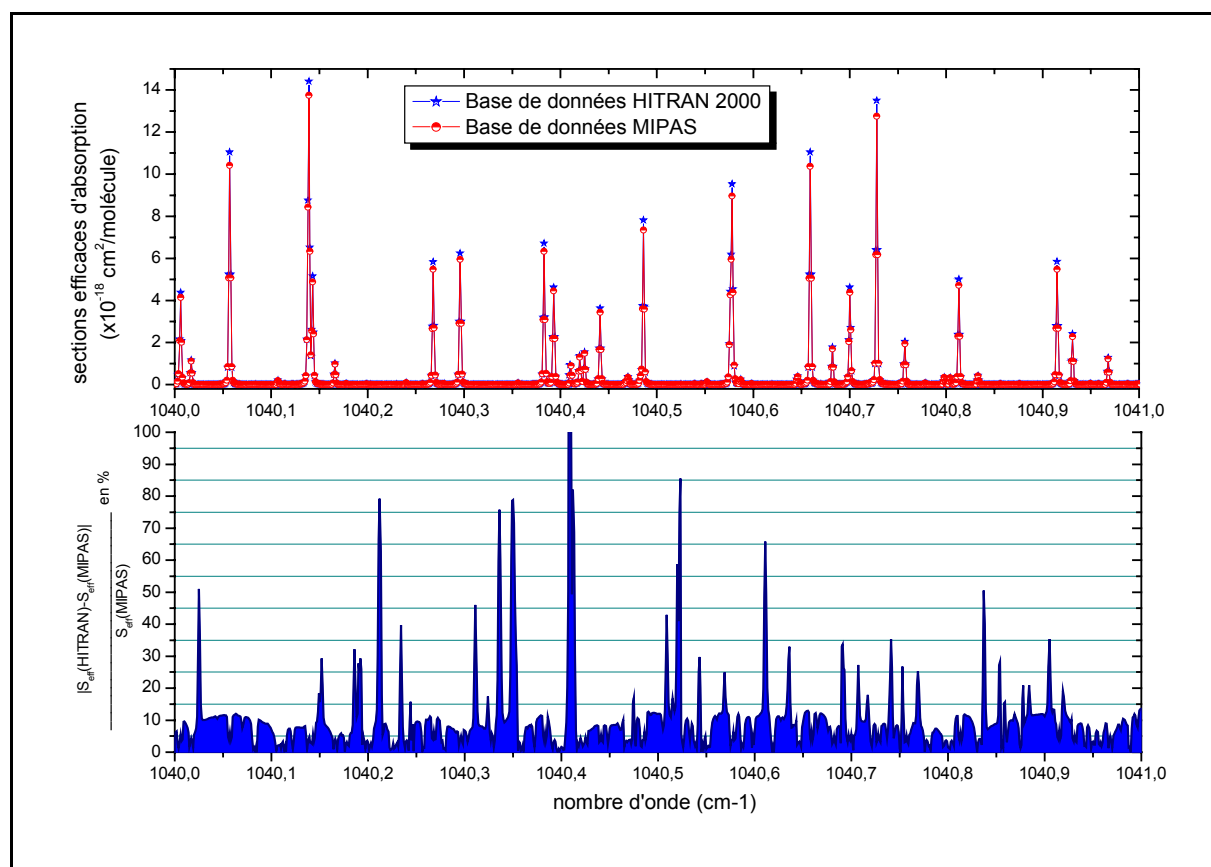


Figure III.16 et III.17 : Calcul des sections efficaces pour l'ozone dans la micro-fenêtre 1040 - 1041 cm^{-1} pour une pression et une température donnée. La figure du haut montre les sections efficaces obtenues à partir des bases de données spectroscopiques HITRAN 2000 et MIPAS. La figure du dessous montre la différence relative en pourcentage des sections efficaces par rapport au calcul avec la base MIPAS.

III.3 Jacobien et noyaux moyens à l'usage de la détermination du profil d'ozone.

III.3.1 Définitions et notations

L'efficacité et la résolution (verticale) d'un sondage à distance peuvent être exprimées de deux manières différentes suivant qu'on considère uniquement la qualité du modèle direct (fonction de poids) ou qu'on tient compte de la « puissance du modèle d'inversion à résoudre les structures fines verticales de l'atmosphère » (noyaux moyens). Ces deux grandeurs permettent de représenter pour chaque spectre, la contribution à l'absorption des molécules de l'espèce étudiée suivant leur répartition en altitude.

Pour faire apparaître les fonctions de poids il faut reprendre l'expression reliant le spectre observé au vecteur d'état et au modèle de calcul direct :

$$y = F(x, b) + \varepsilon \quad (3.1)$$

Dans cette expression x est le vecteur d'état de np paramètres, b représente les paramètres du modèle qui ne sont pas parfaitement connus de l'utilisateur comme par exemple les paramètres spectroscopiques, la fonction d'appareil, les données météorologiques de type profils de température et de pression. Le terme ε est l'erreur expérimentale.

Lors de l'inversion on cherche à déterminer le vecteur d'état qui permet au mieux de simuler le spectre observé au travers l'algorithme du transfert radiatif, ce qui revient à écrire le vecteur sous la forme ;

$$\hat{x} = R[y, b, x_a] = R[F(x, b) + \varepsilon, b, x_a] \quad (3.2)$$

où \hat{x} est le vecteur avec les valeurs des paramètres restitués, R la fonction du modèle inverse, et x_a le vecteur d'état avec les valeurs *a priori* des paramètres recherchés.

En linéarisant le modèle direct au voisinage de x_a on a :

$$\hat{x} = R[F(x_a, b) + K_x(x - x_a) + \varepsilon, b, x_a] \quad (3.3)$$

On fait ainsi apparaître la matrice de fonction de poids ou jacobien K_x qui a été introduit précédemment (2.54) et dont on rappelle l'expression :

$$k_{i,j} = \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \quad (3.4)$$

C'est une matrice K (m points spectraux $\times n$ paramètres inversés) qui n'est pas forcément carrée et dans laquelle chaque élément est une dérivée partielle des éléments du modèle direct (points ou échantillons spectraux) par rapport aux éléments du vecteur état (paramètres inversés).

Les fonctions de poids représentent la sensibilité du modèle aux paramètres que l'on cherche à déterminer. Ces fonctions ont généralement la forme d'un pic en visée au limbe et sont plus élargies en visée à partir du sol ou au nadir. La largeur à mi-hauteur des pics des fonctions de poids donne une information sur la résolution verticale de la mesure, ainsi que sur la sensibilité du spectre par rapport à chaque paramètre inversé (sensibilité en fonction de l'altitude par exemple).

En linéarisant maintenant le modèle inverse R par rapport à y on obtient :

$$\hat{x} = R[F(x_a, b), b, x_a] + G_y[K_x(x - x_a) + \varepsilon, b, x_a] \quad (3.5)$$

où $G_y = \frac{\partial R}{\partial y}$ est la sensibilité de l'inversion par rapport à la mesure. On peut réécrire l'expression (3.5) de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \hat{x} - x_a &= R[F(x_a, b)] - x_a && \dots \text{biais} \\ &+ A(x - x_a) && \dots \text{lissage} \\ &+ G_y \varepsilon && \dots \text{erreur inversée} \end{aligned} \quad (3.6)$$

où

$$A = G_y K_x = \frac{\partial \hat{x}}{\partial X} \quad (3.7)$$

Les lignes de la matrice A ($n \times n$) sont les noyaux moyens (*averaging kernel*) qui peuvent être considérés un par un comme les fonctions responsables du lissage (fonction de moyennage) des paramètres inversés correspondant. Chaque élément du résultat qui provient de l'inversion apparaît comme le produit des valeurs vraies ou recherchées par la fonction de moyennage correspondante. Dans des conditions favorables, les noyaux moyens sont des fonctions en « pics » dont la largeur à mi-hauteur fournit une estimation de la résolution verticale du système d'observation. Dans le cas idéal ces noyaux moyens sont des pics de Dirac. L'intégrale de la surface des noyaux moyens, généralement proche de l'unité, détermine la contribution aux paramètres restitués de la mesure.

A l'aide des noyaux moyens et des fonctions de poids il est possible d'établir la sensibilité de l'inversion pour chaque paramètre inversé et donc d'effectuer une sélection optimale des paramètres en retenant en priorité ceux qui ont le plus de sensibilité sur le spectre et donc qui sont les plus exploitables par le modèle de transfert radiatif. On gagne ainsi en temps de calcul, en limitant le nombre de paramètres que l'on cherche à déterminer, mais aussi en qualité d'ajustement des spectres (et d'inversion). En ayant moins de paramètres à inverser tout en gardant une bonne souplesse dans l'ajustement on évite une trop grande corrélation entre paramètres, qui en général introduit des effets de compensation pouvant conduire à des solutions non physiques.

III.3.2 Fonctions de poids et noyaux moyens des profils d'ozone

L'emploi des fonctions de poids pour l'inversion des spectres dans la fenêtre 950-1100 cm^{-1} , a permis d'évaluer l'efficacité du système instrument/modèle

direct/inversion à restituer le profil vertical d'ozone c'est-à-dire à fournir les rapports de mélange en fonction de l'altitude. Afin de déterminer un profil d'ozone et afin de sélectionner les altitudes pour lesquelles les rapports de mélanges ont le plus de sensibilité pour le modèle de calcul direct, on détermine le jacobien. Les x_j dans la définition de K_x (3.4) sont dans ce cas des coefficients multiplicateurs des rapports de mélange du profil vertical de l'ozone à différentes altitudes. On obtient pour chaque nombre d'onde la sensibilité du modèle par rapport à chaque altitude du profil vertical d'ozone (*Fig. III.18* et *Fig. III.19*)

A partir de la figure III.18 on peut voir que la fenêtre sélectionnée est sensible à presque toutes les altitudes. La bande de l'ozone apparaît bien comme domaine de sensibilité du spectre par rapport aux altitudes, mais la sensibilité est significative pour des raies plus isolées comme celles autour de 1080 cm^{-1} , ce qui montre que les différentes contributions de l'ozone en fonction de l'altitude proviennent de toutes les raies d'ozone présentes dans la fenêtre de $10\text{ }\mu\text{m}$. On remarque tout de même une moindre sensibilité pour les basses altitudes. Ceci montre que la contribution de l'ozone dans les basses altitudes de l'atmosphère devient faible dans cette partie du spectre infrarouge et/ou que l'ozone à des altitudes plus élevées (au-dessus de 4 km environ) masque l'information provenant des basses altitudes. Il faut donc s'attendre à trouver un faible impact des niveaux près de la surface pour la restitution des profils verticaux d'ozone.

Les altitudes qui apparaissent ici comme étant plus efficaces pour la restitution le profil sont entre 5 et $27,5\text{ km}$, avec un pic vers $20 - 22,5\text{ km}$. On peut signaler aussi les altitudes autour de $9 - 11\text{ km}$ et autour de $13 - 18\text{ km}$ pour lesquelles le spectre reste assez sensible.

La visualisation en 3 dimensions des fonctions de poids (*Fig. III.19*) met en évidence l'existence de trois zones avec des « maximums » ; un maximum autour de l'altitude de 7 km , un autre plus large entre 10 et 14 km et un maximum plus intense vers $16 - 20\text{ km}$. On a donc trois zones (ou altitudes) sensibles pour tous les nombres d'onde de la fenêtre (là où il y a présence de raies d'ozone). Il semble donc que 3 niveaux de restitution dans le profil d'ozone soient nécessaires pour ajuster convenablement un profil vertical entre 0 et 30 km . En fait nous ne pouvons réellement prendre que 2 niveaux de restitution. Les deux maxima centrés autour de 18 km et 25 km se recouvrent et de ce fait on peut considérer qu'ils sont corrélés. On se limitera donc à deux niveaux, un autour de 10 km et un second entre 15 et 25 km .

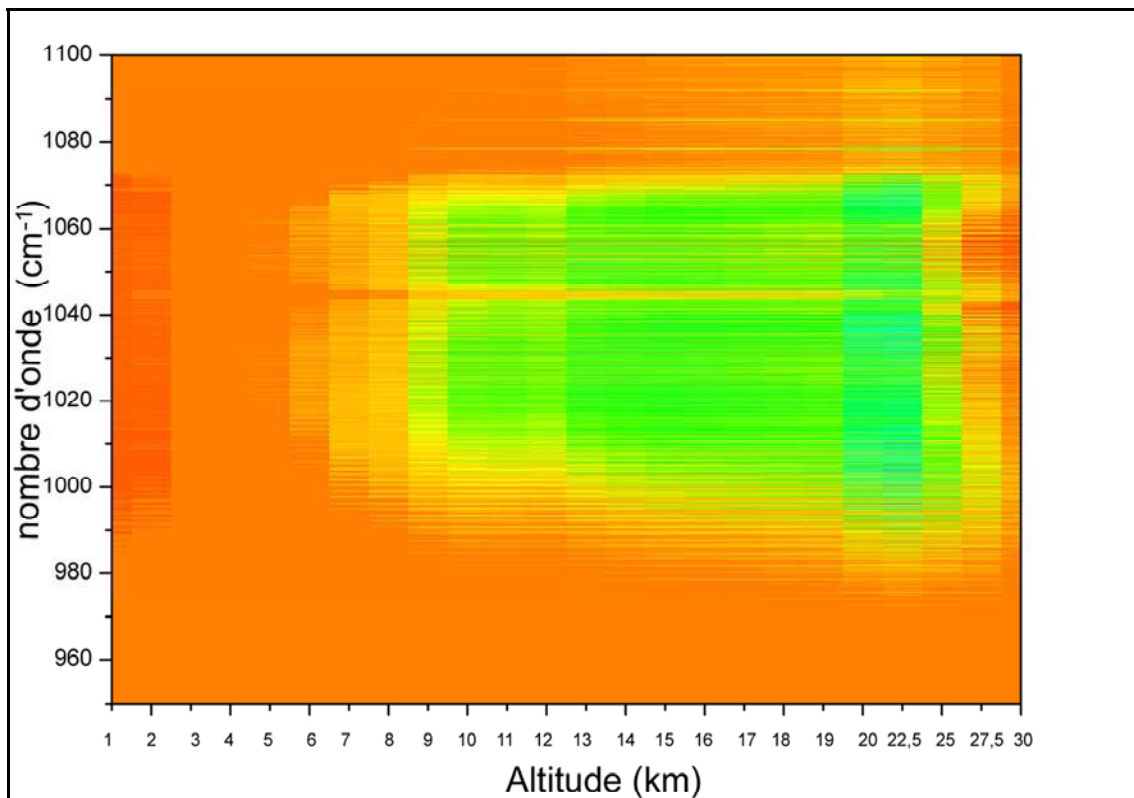


Figure III.18 : Visualisation des fonctions de poids en 2 dimensions obtenue pour chaque altitude du profil d'ozone (vol IASI02), lors de l'inversion de la fenêtre entre 950 et 1100 cm⁻¹.

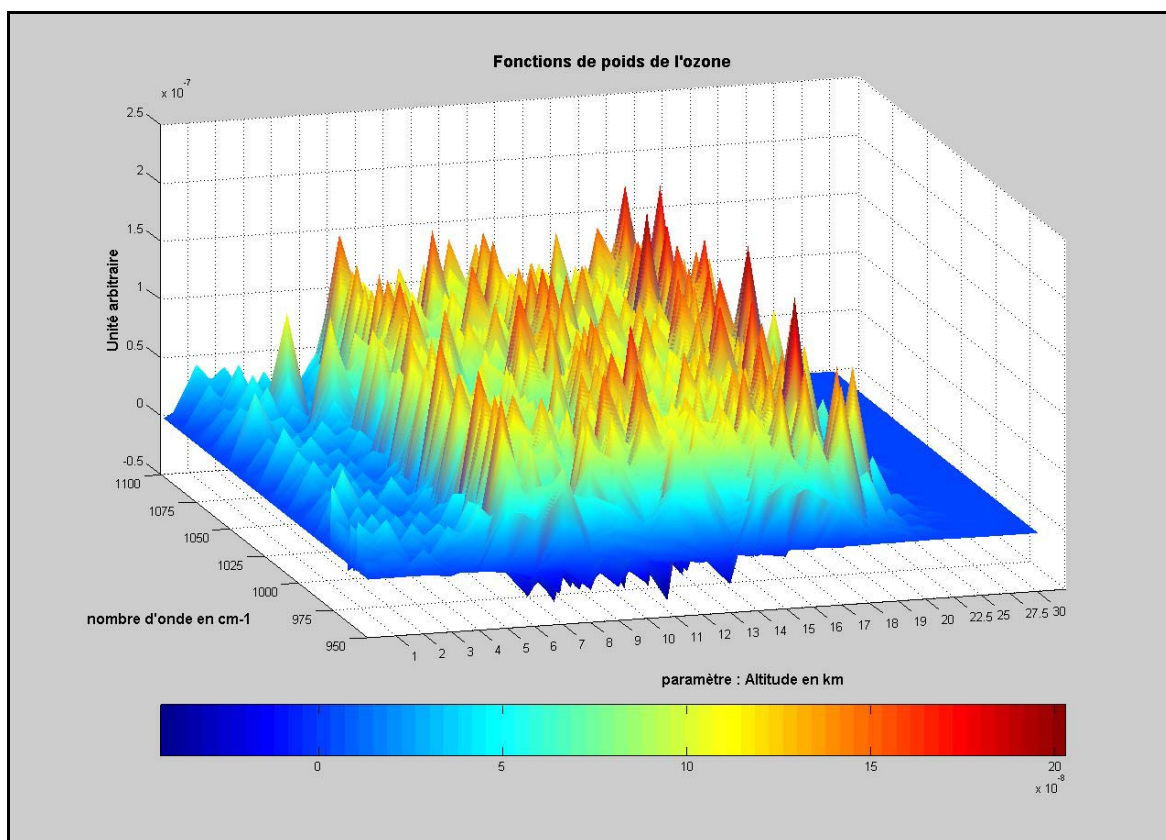


Figure III.19 : Visualisation tridimensionnelle des fonctions de poids pour chaque altitude du profil d'ozone (vol IASI02) lors de l'inversion de la fenêtre entre 950 et 1100 cm⁻¹.

Les fonctions de poids ne permettent pas d'indiquer la résolution verticale pour chaque niveau de restitution. On utilise à cet effet les noyaux moyens. Comme on l'a dit plus haut, les noyaux moyens permettent de quantifier la contribution des paramètres qu'on inverse pour le modèle de calcul direct et pour l'inversion. On ne voit pas l'impact des paramètres sur le spectre mais plutôt leur sensibilité à travers le processus de simulation et d'inversion des spectres.

La figure III.20 montre les noyaux moyens obtenus en utilisant comme paramètres restitués les rapports de mélange aux différentes altitudes du profil vertical d'ozone. Le changement de base de données spectroscopiques n'a pas d'influence notable sur les noyaux moyens, et on a exactement la même forme et les mêmes amplitudes avec la base HITRAN 2000 ou la base MIPAS.

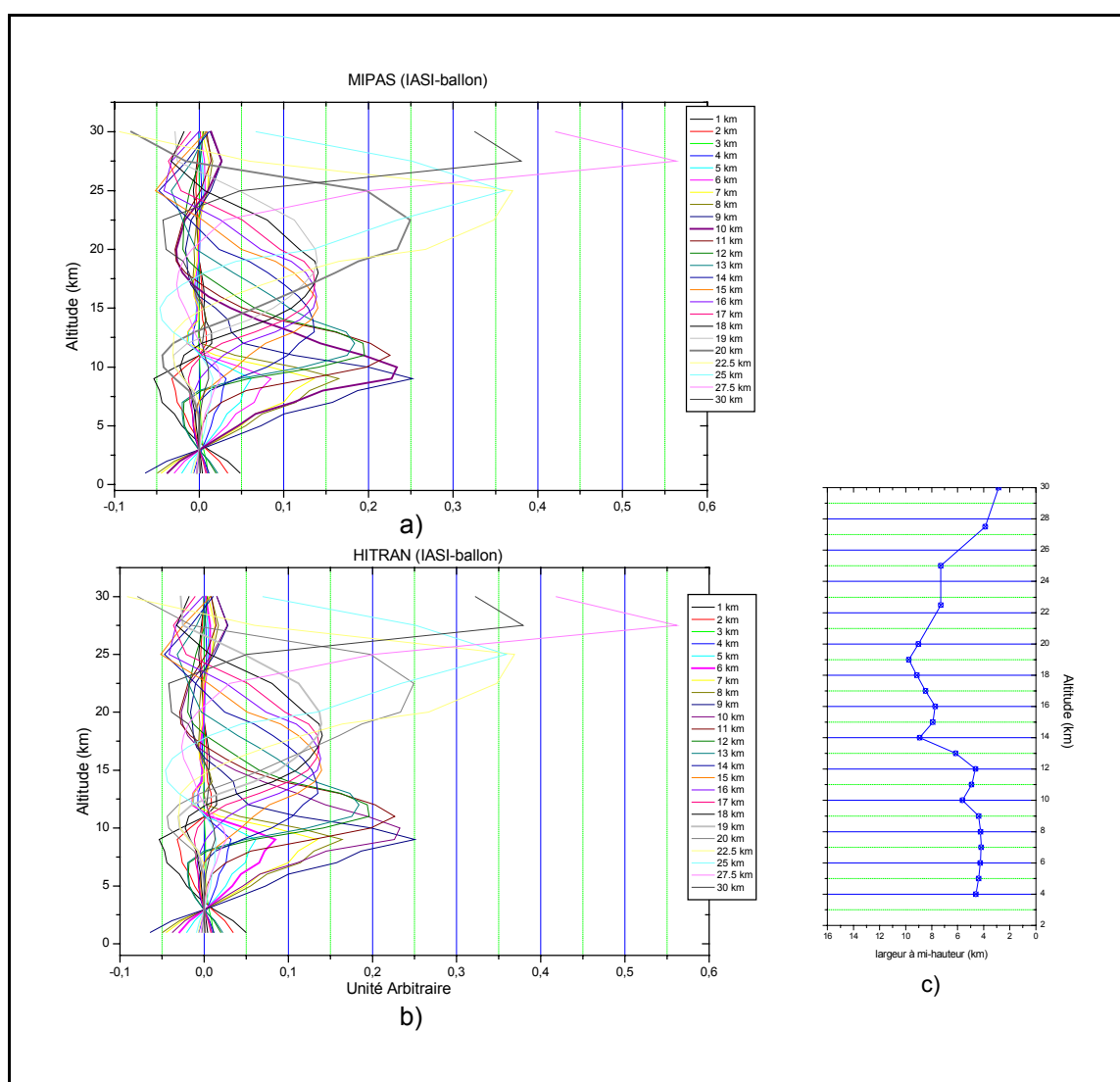


Figure III.20: Noyaux moyens obtenus pour le profil d'ozone en utilisant les bases spectroscopiques MIPAS et HITRAN 2000. Chaque noyau correspond à une altitude de restitution possible du profil d'ozone. En bas à droite on a tracé en fonction de chaque altitude de restitution la largeur à mi-hauteur du pic du noyau moyen correspondant.

Comme pour les fonctions de poids, on retrouve trois régions dans les profils qui sont intéressantes pour leur sensibilité à travers le modèle ; une région entre 7 et 10 km, une autre entre 10 et 20 km et enfin une autre autour de 25 km. Pour éviter des corrélations entre paramètres lors de l'inversion, le choix des niveaux de restitutions doit se faire de manière à ce que les largeurs à mi-hauteur des noyaux moyens soient disjointes. En toute rigueur il faudrait que les noyaux moyens ne se recouvrent pas. Mais on peut considérer que si le recouvrement de 2 noyaux moyens se fait sur des zones au-delà de la largeur à mi-hauteur, même s'il y a corrélation, celle-ci reste faible et acceptable (c'est le critère de Rayleigh utilisé en optique). Il est possible de faire 2 choix différents quant à la sélection des noyaux moyens tout en évitant les corrélations. Si on fait le choix de prendre un niveau de restitution entre 10 et 20 km (*Fig. III.20 b*), du fait que les pics sont très « étalés », cela nous interdit de sélectionner un autre niveau sans que ces derniers soient corrélés entre eux en ce qui concerne les noyaux moyens. On limite donc ce choix à 2 niveaux de restitution : un premier niveau correspondant aux noyaux moyens autour de 10 km et un deuxième niveau correspondant aux noyaux moyens au-dessus de 15 km.

La résolution verticale que l'on obtient à partir de la largeur à mi-hauteur des noyaux moyens (*Fig. III.20 c*) varie entre 4 et 10 km, ce qui est une valeur relativement bonne compte tenu que l'on effectue un sondage en visée au nadir. En effet lors de sondages au limbe, il est possible d'atteindre une résolution verticale de 1 km, mais pour cela on dispose d'un ensemble de spectres dans différentes géométries caractérisées par des altitudes différentes. Dans le cas de sondage au nadir toute l'information sur toutes les altitudes entre le sol et l'instrument est contenue dans un seul spectre. On obtient donc ici malgré tout une assez bonne résolution verticale pour le profil vertical d'ozone. Le choix des deux niveaux de restitution permet de prendre en compte de façon optimale la résolution verticale intrinsèque du système d'observation. Pour effectuer la sélection des altitudes pour lesquelles on ajuste au mieux le profil il convient d'effectuer des essais et de faire une comparaison du profil inversé avec le sondage ozone effectué le jour du vol. C'est ce qui va être discuté ci-dessous.

III.3.3 Sélection des niveaux de restitution des profils

Pour effectuer une sélection des niveaux de restitution pour une meilleure inversion des profils d'ozone, nous avons exécuté une série de tests. Pour un ajustement optimal des spectres, on peut comparer les profils inversés et ajustés en prenant comme référence le sondage ozone effectué par une sonde le jour même du vol IASI02.

Plusieurs tests ont été effectués sur des spectres du vol IASI01 (spectres obtenus dans la région de Kiruna en 2001) en utilisant 2, 3 ou même 4 niveaux de restitution afin de vérifier si le choix de 2 niveaux est la meilleure solution. Sur la figure III.21 présente les résultats de certains de ces tests. Chaque segment de couleur représente une portion du profil ajusté de manière « indépendante » par l'algorithme LARA et avec un critère de continuité entre eux. Les coefficients multiplicateurs du profil initial sont interpolés linéairement entre 2 niveaux de restitution. Pour les coefficients correspondant aux altitudes entre 0 et le premier niveau de restitution, ils prennent la même valeur que le premier coefficient ajusté. Cela correspond à une translation du profil par rapport au profil initial (dans le domaine d'altitude correspondant). Il en va de même pour le profil compris entre le dernier niveau de restitution et la fin de la partie haute du profil.

Sur la Figure III.21 c) on a tracé le profil *a priori* qui est la solution de départ dans les ajustements. On peut ainsi voir la « souplesse » du profil lors des ajustements et constater que la contrainte exercée sur les paramètres inversés permet tout de même au profil de varier sans être trop contraint par rapport au profil initial.

On observe sur le sondage, dans la région de la tropopause, une diminution brusque qui n'existe pas dans le profil de départ. Il est donc difficile, à travers notre algorithme, de prendre en compte cette variation rapide et localisée en fonction de l'altitude (sauf si on utilise le sondage comme profil initial). Un des ajustements a été effectué en considérant des niveaux de restitution autour de la tropopause (*Fig. III.20 h*) mais on constate des effets de compensation et des variations dans les profils qui ne correspondent pas à une solution physique. Cela vient du fait que les niveaux de restitution sont trop proches les uns des autres et donc qu'il y a une forte corrélation entre ces niveaux (noyaux moyens qui se superposent).

Dans le cas de l'inversion de profils avec 3 niveaux de restitution (*Fig. III.21 d, f et g*), on obtient un assez bon accord avec le sondage jusqu'à une altitude de 20 km environ. Au-delà on observe un écart prononcé avec des barres d'erreur importantes. Bien qu'on dispose théoriquement de 3 informations indépendantes, d'après l'analyse des noyaux moyens, il est difficile de trouver un choix de 3 altitudes pour lesquelles on arrive à ajuster le profil de manière à être en accord avec le sondage. Cela revient à dire que la corrélation entre les 2 altitudes les plus élevées reste trop importante pour effectuer la restitution du profil d'O₃ avec 3 informations complètement indépendantes.

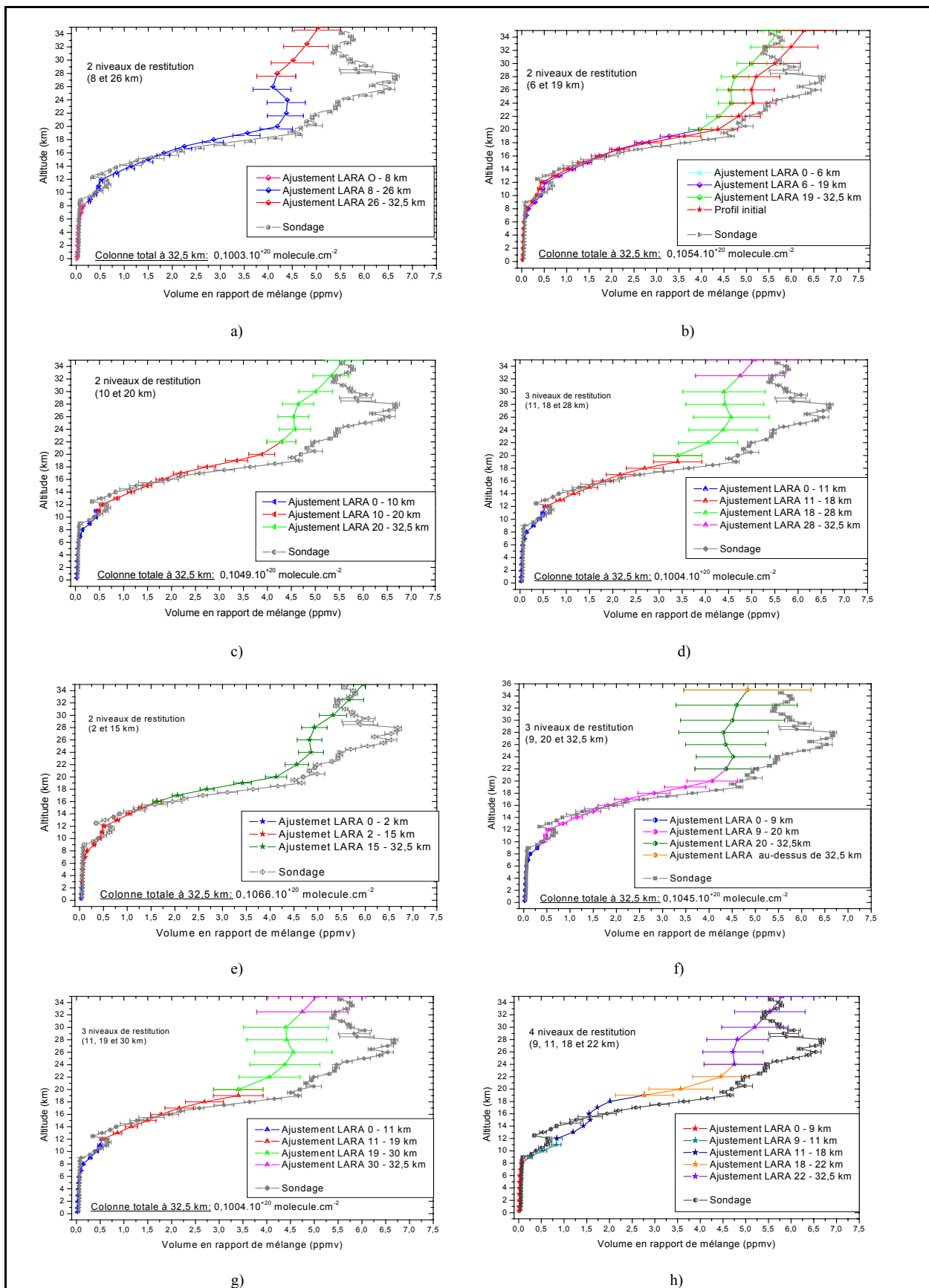


Figure III.21 : Exemples de profils restitués en utilisant différents niveaux de restitution lors de l'inversion et comparaison avec le sondage ozone effectué le jour du vol IASI01.

On obtient un meilleur accord lors de l'inversion des profils avec deux niveaux de restitution (*Fig. III.21 a, b, c et e*). Cependant le choix d'une altitude dans la basse troposphère (*Fig. III.21 e*) est peu recommandé, car peu sensible comme l'ont montré les fonctions de poids. De même on obtient un profil non physique lorsqu'un des niveaux est trop proche du plafond du ballon (*Fig. III.21 a*). Dans notre cas 26 km semble déjà être une altitude où l'information contenue dans le spectre et la sensibilité par rapport au modèle n'est plus suffisante pour la restitution du profil d'O₃.

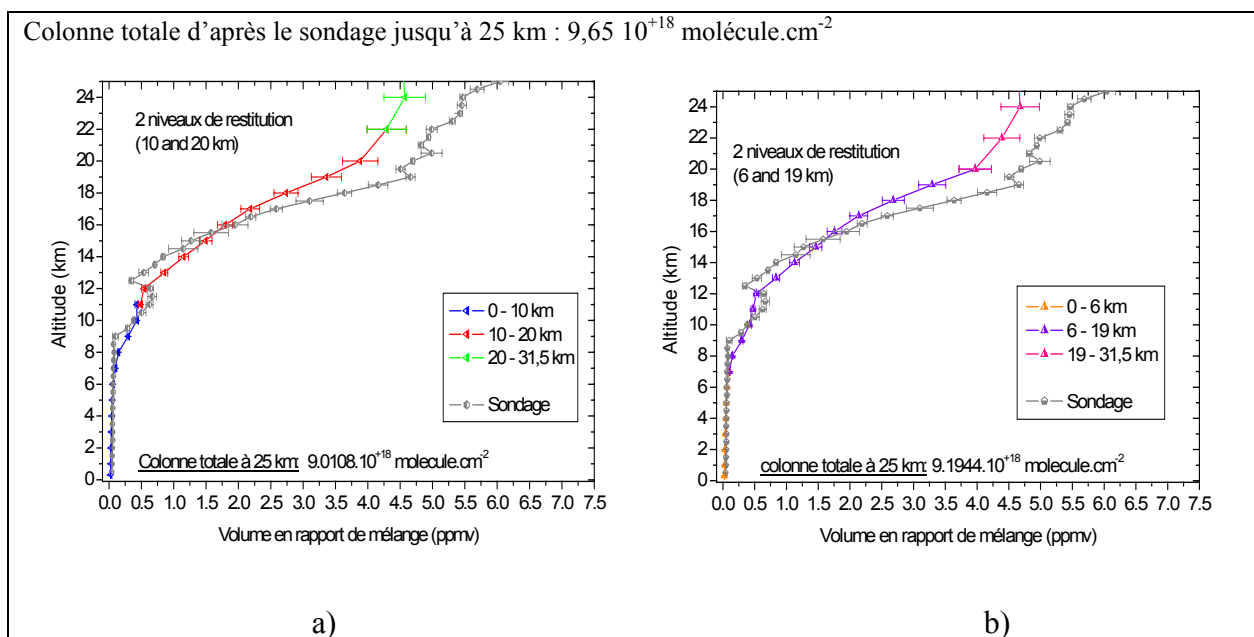


Figure III.22 : Exemples de profils restitués en utilisant 2 niveaux de restitution lors de l'inversion et comparaison avec le sondage ozone effectué le jour du vol IASI01

Les meilleurs accords entre le sondage ozone et les profils inversés sont obtenus avec deux niveaux de restitution aux altitudes de 6 et 19 km ou 10 et 20 km. La colonne totale intégrée entre 0 et 32,5 km a sensiblement la même valeur. En fait le sondage est fiable jusqu'à une altitude de 25 km et au-delà le processus de mesure de la sonde dans les conditions atmosphériques de la moyenne stratosphère ne sont plus d'une grande précision (variation de l'efficacité de la pompe, effet de la température,...). Il faut donc comparer la colonne totale du sondage et celle des profils ajustés entre 0 et 25 km (*Fig. III.22*). On constate un bon accord entre les colonnes totales intégrées obtenues par inversion des spectres infrarouges et déduites du profil d'ozone de la sonde. Nous considérons tout de même que les niveaux à 6 et 19 km donnent une colonne totale plus proche de celle mesurée par la sonde. De plus, il est plus judicieux d'avoir un niveau de restitution dans la troposphère et un dans la stratosphère plutôt que deux dans la stratosphère. Du point de vue des noyaux moyens, en choisissant les altitudes

de 6 et 19 km, on évite une éventuelle corrélation entre les niveaux même si comme le montre la figure III.20 (avec le choix d'altitudes 10 et 20 km) celle-ci reste faible.

III.3.4 L'inversion des profils d'ozone au cours du vol IASI02

A partir de l'expérience obtenue pour l'inversion des spectres IASI01, nous avons effectué l'inversion de tous les spectres IASI02 dans la fenêtre $950 - 1100 \text{ cm}^{-1}$ avec deux niveaux de restitution à 6 et 19 km pour le profil d'ozone. La comparaison avec le sondage effectué le jour du vol montre un très bon accord (Fig. III.23). De plus on peut constater que la contrainte sur le profil ne force pas trop la solution puisque le profil *a priori* est assez éloigné des valeurs finales, solution de l'ajustement et de l'inversion des spectres. Tout comme pour IASI02 le sondage n'est fiable que jusqu'à 25 km, ce qui permet de dire que les profils restitués à partir des spectres dans l'infrarouge thermique permettent une bonne détermination de la quantité d'ozone présente dans la troposphère jusqu'à la stratosphère moyenne.

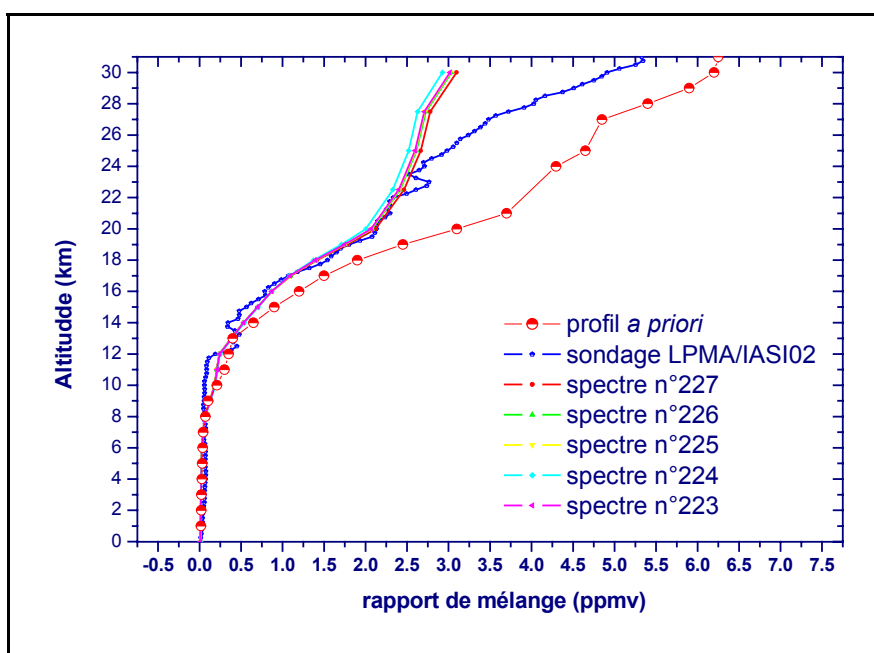


Figure III.23 : Comparaison entre profils d'ozone inversés à partir des spectres IASI-ballon et le sondage d'ozone effectué le même jour.

Sur la figure III.23 on voit que les profils obtenus avec les spectres n° 223 à 227 (fin du vol IASI02) sont peu dispersés et cela bien que la scène visée ait changé. Cela s'explique par le fait que la variabilité géographique (entre deux enregistrements de spectres) est faible pour l'ozone et que la variation de l'altitude au sol a un impact minime. De même nous avons vu

que le relief survolé par le ballon fluctue (*Fig. III.2*), mais la quantité d'ozone dans les couches basses reste faible même si l'atmosphère est dense. D'autre part comme l'ont montré les fonctions de poids et les noyaux moyens, il est difficile à partir du spectre infrarouge d'accéder à l'information dans les basses altitudes.

En conséquence, il n'est pas étonnant de ne pas avoir de grandes fluctuations des profils restitués tout au long du vol. L'erreur statistique sur les valeurs des rapports de mélange le long du profil d'ozone est faible et pas forcément significative. Mais on peut estimer qu'au minimum on doit tenir compte d'une erreur de 2 % due aux paramètres spectroscopiques.

Les profils d'ozone restitués pour l'ensemble des spectres du vol IASI02 montrent une bonne homogénéité. En effet en définissant un profil moyen et en déterminant l'erreur RMS on constate (*Fig. III.24*) que la quasi totalité des profils est contenue dans le profil moyen plus ou moins l'erreur RMS. On rappelle que l'erreur RMS (root mean square) est définie par la quantité :

$$\sigma_{RMS}(z) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_i(z)^2} \quad (3.8)$$

Dans cette équation : N est le nombre de profil et $R_i(z)$ est le rapport de mélange du profil i pour une altitude z fixée.

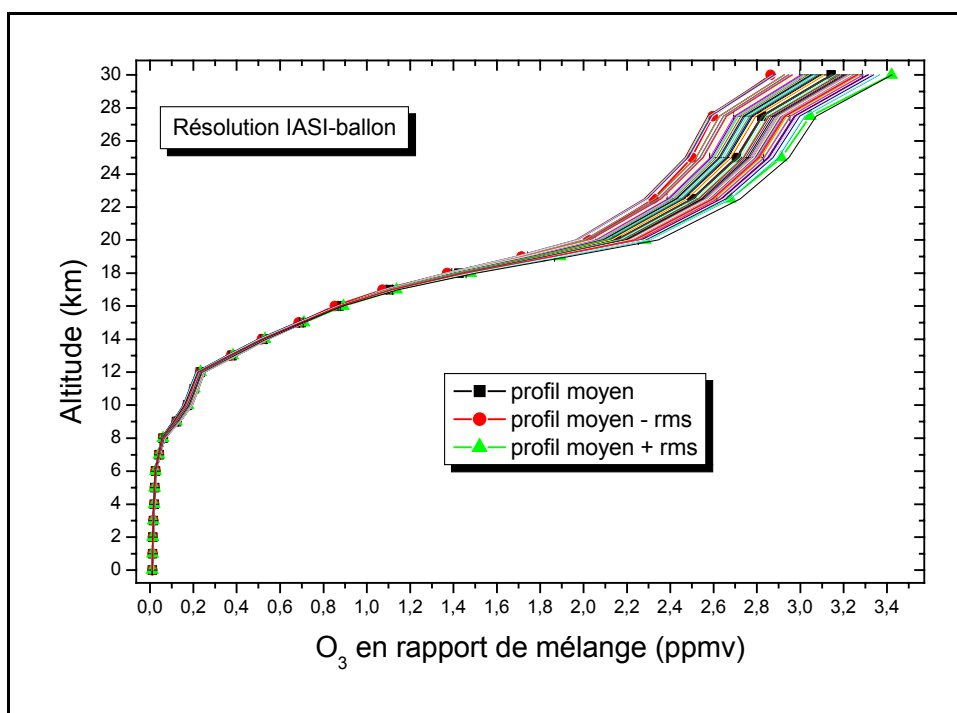


Figure III.24 : Ensemble des profils d'ozone inversés à partir des spectres IASI02 avec deux altitudes de restitution à 6 et 19 km.

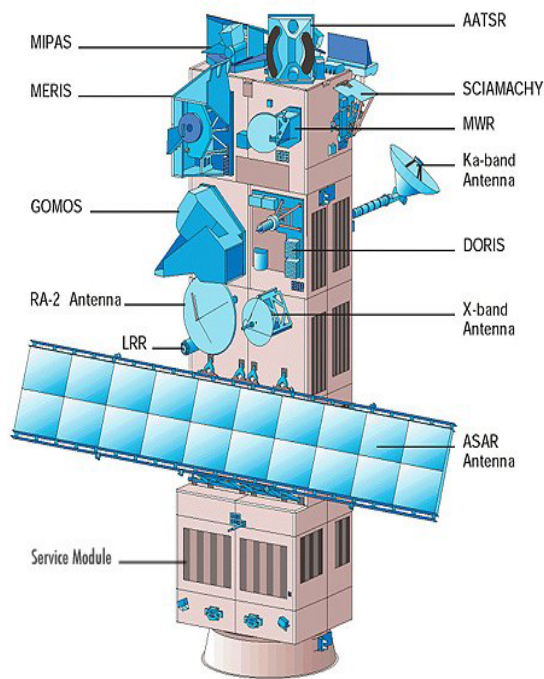
On peut estimer que la probabilité pour que le profil vrai soit contenu dans cet encadrement est d'environ 68%. Cela suppose que le profil moyen soit le profil vrai, solution de toutes les inversions. Cette hypothèse reste acceptable étant donné que la variabilité géographique ainsi que les variations dans le temps ne sont pas trop grandes en ce qui concerne de l'ozone troposphérique et stratosphérique.

III.3.5 Validation de l'instrument SCIAMACHY.

Les résultats des inversions des spectres infrarouges du vol IASI02 ont été utilisés pour la validation de l'instrument SCIAMACHY (Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography) [DUF04] embarqué sur le satellite ENVISAT (Fig. III.25). Le principal objectif scientifique de SCIAMACHY est la mesure globale de nombreux constituants minoritaires de la troposphère (par visée au nadir) et de la stratosphère (par visée au limbe). Les résultats obtenus sont destinés à l'étude d'une grande gamme de phénomènes liés à la chimie atmosphérique. Dans la troposphère, l'étude de la pollution globale, des panaches de pollution industrielle, des feux de forêts, du brûlage de la biomasse, des tempêtes de sable et du brouillard arctique font partie des objectifs de l'instrument SCIAMACHY. Dans la stratosphère, l'instrument participe à l'amélioration de la compréhension de la chimie de l'ozone, de l'effet des éruptions volcaniques et des événements à protons solaires.

SCIAMACHY est un spectromètre imageur à balayage. Il détecte le rayonnement transmis, rétrodiffusé et réfléchi par l'atmosphère dans un large domaine spectral allant de l'ultraviolet à l'infrarouge (240 à 2400 nm). Le rayonnement collecté par un télescope est partagé et détecté dans 8 canaux spectraux différents (Tab. III.2). Les principales espèces chimiques mesurées par SCIAMACHY sont : O₃, CH₄, N₂O, H₂O, NO₂, NO, NO₃, CO, CO₂, BrO, OClO, O₂ et (O₂)₂.

L'instrument SCIAMACHY utilise 3 géométries de visée différentes pour sonder l'atmosphère : visée au nadir, au limbe et en occultation solaire ou lunaire. Différents produits sont restitués à partir des spectres en fonction de la nature de chacune des géométries. Les spectres enregistrés par visée au nadir fournissent principalement les colonnes verticales des constituants minoritaires sondés comme l'ozone. On doit noter l'importance de l'instrument puisqu'il est un des rares sondeurs satellitaires ayant pour mission le sondage de l'ozone troposphérique par visée au nadir.



Canal	Domaine Spectral (nm)	Résolution Spectrale (nm)	Molécules, paramètre atmosphériques
1	240 - 314	0,24	O ₃ , NO ₂ , NO ₃ , BrO,
2	309 - 405	0,26	OCIO, O ₄ , SO ₂ ,
3	394 - 620	0,44	H ₂ CO, aérosols,
4	604 - 805	0,48	nuages
5	785 - 1050	0,54	H ₂ O, CO, CO ₂ , N ₂ O,
6	1000 - 1750	1,48	CH ₄ , p, T, aérosols,
7	1940 - 2040	0,22	Nuages
8	2265 - 2380	0,28	
Domaine d'altitude :		0 - 100 km	
Résolution spatiale :		horizontale 32 km	Verticale 3 km

Figure III.25 : Satellite ENVIAT et ses différents instruments (source : <http://envisat.esa.int/>).

Tableau III.2: Caractéristiques et performances de l'instrument SCIAMACHY.

Actuellement les seuls produits opérationnels de SCIAMACHY disponibles sont les colonnes mesurées en coïncidence avec le vol IASI02. On présente les colonnes mesurées par IASI02 et par SCIAMACHY en fonction de la position du sondage (en latitude et longitude), les mesures SCIAMACHY ayant été effectuées le même jour que le vol ballon (Fig. III.26). La coïncidence spatiale des mesures IASI02 et SCIAMACHY est raisonnable. Les colonnes d'ozone pour SCIAMACHY ont été inversées à partir des canaux 1 et 2. La mesure IASI02 donnée LRR correspond à la valeur moyenne des colonnes totales intégrées à partir de la restitution des profils de l'ozone durant le vol IASI02.

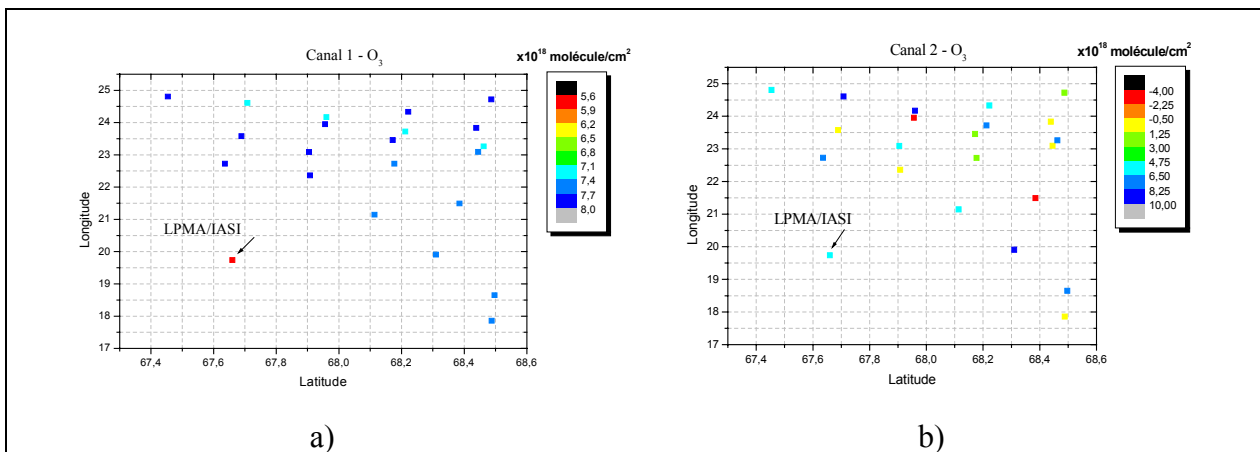


Figure III.26 : Colonnes d'ozone mesurées par LPMA/IASI02 et par SCIAMACHY dans la bande 1 (a) et la bande 2 (b) en fonction de la position géographique de la mesure. [DUF04]

Dans la figure III.27, on compare la colonne moyenne obtenue par IASI-ballon avec les mesures de SCIAMACHY pour les différentes localisations indiquées sur la figure III.26. La comparaison IASI02 et SCIAMACHY montre un biais systématique d'environ 30% sur les colonnes d'ozone.

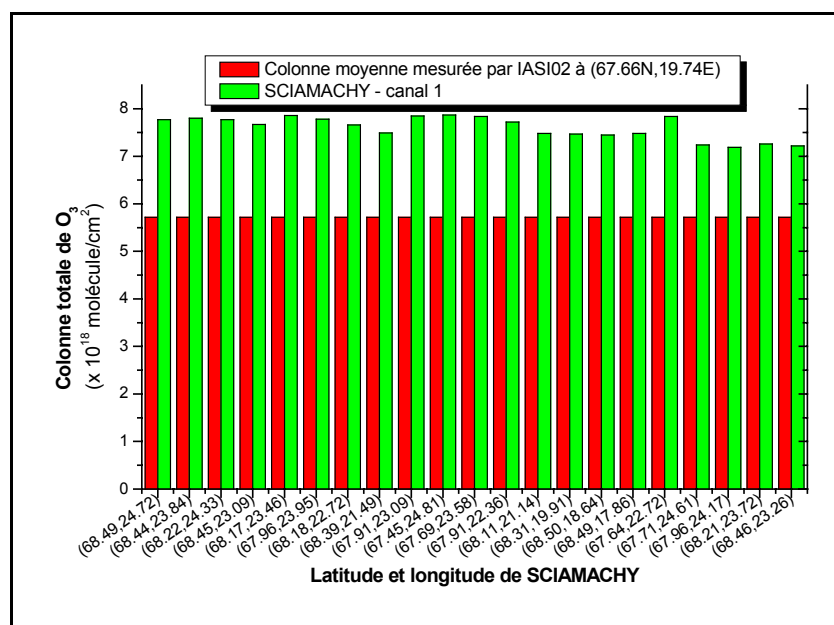


Figure III.27 : Comparaison des colonnes d'O₃ mesurées par SCIAMACHY dans la bande 1 à la colonne moyenne mesurée par IASI-ballon. [DUF04]

Nous estimons actuellement que SCIAMACHY surestime les colonnes d'ozone. Des améliorations sont en cours pour SCIAMACHY en ce qui concerne les algorithmes (en particulier la détermination des profils d'ozone), mais on peut conclure que ces premiers résultats sont encourageants pour le sondage satellitaire de l'ozone troposphérique en visée au nadir dans l'UV-vis. Mais clairement la combinaison des données dans l'infrarouge et l'UV-vis sera intéressante (voir par exemple IASI et GOME-2 sur MetOp).

III.4 Entropie informationnelle et nombre de degrés de liberté

L'information est un terme général, qui est parfois utilisé avec des sens différents selon les auteurs qui l'emploient. Le nombre de degrés de liberté d'un signal peut par exemple être considéré comme une mesure de l'information. Rodgers reprend le concept de l'information selon la formulation de Shannon et l'applique aux problèmes d'inversion de sondages atmosphériques. A partir de l'entropie informationnelle et de la notion de nombre de degrés de liberté il est possible d'estimer l'information contenue dans un spectre pour une espèce chimique donnée.

III.4.1 Notion d'entropie informationnelle selon Shannon [\[SHA62\]](#)

L'entropie informationnelle exprime l'information sous forme d'une mesure de la liberté de choix dont on dispose lorsqu'on envoie ou reçoit un message. Si l'on a affaire à une situation très élémentaire où le choix se fait entre les deux termes d'une alternative on dit dans ce cas par convention, que l'information est égale à l'unité. Le concept d'information ne s'applique pas aux messages individuels (comme le ferait le concept de signification), mais plutôt à la situation globale : l'unité d'information indique que l'on dispose, dans cette situation, d'une certaine liberté dans l'écriture ou la lecture du message, qu'il convient de considérer comme une quantité d'information élémentaire ou unitaire.

La quantité précisément nécessaire à l'établissement de « l'information » correspond étroitement à la notion thermodynamique de l'entropie. Elle s'exprime en terme de probabilité : celle nécessaire pour l'accession à un certain stade du processus de formation des messages et celle, une fois ces stades atteints, prévoyant le choix suivant de certains symboles.

Ainsi, pour une source de communication, on peut dire, tout comme pour un ensemble thermodynamique : « cette situation est hautement organisée, le hasard ou le choix sont donc limités, c'est-à-dire l'information (ou l'entropie) est faible ».

Ayant calculé l'entropie (ou l'information, ou la liberté de choix) d'une source, on peut la comparer à la valeur maximale qu'elle pourrait avoir, à condition toutefois que la source continue d'utiliser les mêmes symboles. Le rapport entre l'entropie présente et l'entropie maximale est appelé l'entropie relative de la source. Si l'entropie relative est disons de 0,8 cela signifie grossièrement que cette source possède 80% de liberté possible dans l'utilisation de ces mêmes symboles pour coder les messages. Le complément à 1 de l'entropie relative est appelée redondance. Dans le cas d'un ensemble d'évènements i ayant pour probabilité d'être choisi p_i , on peut définir l'entropie informationnelle de la manière suivante :

$$H = -\sum_i p_i \log_2 p_i \quad p_i \in [0,1] \quad p_i \text{ probabilité de choix}$$

et $0 \leq H \leq 1$ (3.9)

Dans le cas limite où une probabilité vaut l'unité (cas de la certitude) et où toutes les autres probabilités de choix sont nulles, H devient alors nul (aucune incertitude, pas de liberté de choix, pas d'information). Ainsi H est le plus grand quand toutes probabilités sont égales (c'est-à-dire quand le choix est complètement libre ou indifférent) et il est égal à zéro quand la

liberté de choix disparaît. Si la liberté est faible, H a une valeur très petite, l'information (liberté de choix, incertitude) est faible.

Si tous les choix sont sensiblement équivalents, plus ils sont nombreux et plus H sera grand. Il y a plus « d'information » si l'on opère un libre choix parmi un ensemble de 50 messages standards que si le libre choix ne se fait que parmi un ensemble de 25 messages. Plus l'information est grande, plus grande est l'incertitude d'avoir réellement choisi tel message particulier. Ainsi, une grande liberté, une grande incertitude, et une grande information vont de pair : on peut même faire la distinction entre un message avec et sans bruit. On dira qu'il y a une incertitude désirable quand il n'y a pas de bruit dans l'information et que le bruit seul est une source d'incertitude indésirable.

La quantité H a un certain nombre de propriétés intéressantes justifiant ultérieurement son utilisation comme mesure raisonnable du choix ou de l'information :

- $H = 0$ si et seulement si tous les p_i sont nuls sauf un qui est égal à l'unité. Ainsi H s'annule seulement lorsque nous sommes certains du résultat, autrement, H est positif.
- Pour un nombre n donné d'évènements, H est maximal et égal à $\log_2 n$ quand tous les p_i sont égaux c'est-à-dire que l'on a $p_i = 1/n$. C'est aussi, intuitivement, la situation la plus incertaine.
- $H(x, y) \leq H(x) + H(y)$ avec l'égalité si et seulement si les deux évènements (x et y) sont indépendants, c'est-à-dire si $p(x, y) = p(x) p(y)$. L'incertitude sur l'évènement résultat de la combinaison de 2 évènements est inférieure ou égale à la somme des incertitudes individuelles.

III.4.2 Détermination de l'entropie informationnelle et des degrés de liberté dans la restitution de profils d'ozone.

L'entropie dans son sens thermodynamique est définie à partir du nombre d'états microscopiques distincts d'un système thermodynamique pour une valeur donnée d'un macro-état (température, pression, énergie, etc.). L'entropie est une grandeur liée au nombre d'états physiques internes possibles, pour la mesure effectuée sur un système. Cela sous-entend l'existence d'une fonction de densité de probabilité (*pdf*) comme une mesure de la connaissance d'un système. La définition de l'entropie thermodynamique selon Gibbs et la

définition de l'information (entropie informationnelle) d'un système selon Shannon se rejoignent.

$$S(P) = -k \sum_i p_i \ln p_i \quad (3.10)$$

Dans la théorie de l'information de Shannon $k = 1$ et le logarithme est couramment pris en base 2. Pour une *pdf* continue, p_i correspond à un poids statistique $P(x)dx$ ce qui modifie l'expression (3.10) et permet d'exprimer l'entropie informationnelle en fonction de la densité probabilité suivant la formule :

$$S(P) = - \int P(x) \log_2 [P(x) / M(x)] dx \quad (3.11)$$

La quantité M est déterminée de manière à ce que P / M soit sans dimension et que $P = M$ corresponde à un état de non connaissance de x . Ainsi le choix de M est analogue au troisième principe de la thermodynamique, et le fait que $P = M$ détermine le zéro d'entropie.

Si $P_1(x)$ décrit la connaissance avant la mesure et si $P_2(x)$ décrit celle après la mesure, alors l'information contenue dans la mesure qui vient d'être réalisée est une différence d'entropie (exprimée en unité de bits) :

$$H = S(P_1) - S(P_2) \quad (3.12)$$

L'information contenue dans une mesure peut être définie dans l'espace des états. Dans l'espace des états cela dépend de l'entropie de la *pdf* de l'état avant et après la mesure :

$$\begin{aligned} H &= S[P(x)] - S[P(x/y)] \\ &= \frac{1}{2} \ln |S_a| - \frac{1}{2} \ln |\hat{S}| \\ &= \frac{1}{2} \ln |\hat{S}^{-1} S_a| \end{aligned} \quad (3.13)$$

où \hat{S} est la covariance de \hat{x} (le vecteur avec les valeurs des paramètres restitués) et S_a est l'estimation *a priori* de la variance-covariance des paramètres restitués. Dans le cas d'une distribution gaussienne des valeurs restituées, Rodgers détermine :

$$\hat{S}^{-1} = K^T S_\varepsilon^{-1} K + S_a^{-1} \quad (3.14)$$

En combinant (3.13) et (3.14) on a :

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2} \ln \left| (K^T S_\varepsilon^{-1} K + S_a^{-1}) S_a \right| \\
&= \frac{1}{2} \ln \left| S_a^{1/2} K^T S_\varepsilon^{-1} K S_a^{1/2} + I_n \right|
\end{aligned} \tag{3.16}$$

On peut alors définir l'entropie informationnelle en reprenant les notations du formalisme déjà utilisées dans le chapitre II :

$$H = \sum_{i=1}^n H_i = -\frac{1}{2} \log_2 |I_n - A| = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \log_2 (1 + \lambda_i^2) \tag{3.17}$$

où :

$$A = GK = (K^T S_\varepsilon^{-1} K + S_a^{-1})^{-1} K^T S_\varepsilon^{-1} K \tag{3.18}$$

A est la matrice des noyaux moyens (cf. Chap. III.3) et I_n la matrice identité de rang n . La deuxième expression de H dans l'expression (3.17) est en fait beaucoup plus facile à mettre en application puisque les λ_i sont les valeurs singulières de la matrice \tilde{K} définie par :

$$\tilde{K} = S_\varepsilon^{-1/2} K S_a^{1/2} \tag{3.19}$$

Dans l'équation précédente, S_ε est la matrice d'erreur instrumentale, S_a la matrice variance/covariance *a priori* et K le jacobien.

La matrice \tilde{K} est de dimension $(m \times n)$ avec $m > n$. La quantité m représente le nombre de points spectraux (ou points de mesure) dans la fenêtre du spectre inversé et n le nombre de paramètres que l'on ajuste lors du processus d'inversion.

En pratique, il est difficile d'effectuer la décomposition en valeur singulière (SVD) de \tilde{K} du fait de sa grande dimension (par exemple pour la fenêtre 950 – 1100 cm^{-1} , on a typiquement une matrice de 6950 lignes \times 24 colonnes). Il faut alors utiliser les propriétés des matrices liées à leur développement en valeurs singulières. La racine carrée des valeurs propres de la matrice $\tilde{K}^T \tilde{K}$ ou $\tilde{K} \tilde{K}^T$ définit les valeurs singulières de la matrice \tilde{K} . De plus $\tilde{K} \tilde{K}^T$ et $\tilde{K}^T \tilde{K}$ sont des matrices carrées symétriques et ont les mêmes valeurs propres non nulles. On a donc comme égalité :

$$[\tilde{K}\tilde{K}^T]^T = [\tilde{K}\tilde{K}^T] \text{ et } [\tilde{K}^T\tilde{K}]^T = [\tilde{K}^T\tilde{K}] \quad (3.20)$$

En choisissant le produit de matrice $\tilde{K}^T\tilde{K}$ ou $\tilde{K}\tilde{K}^T$ de manière à avoir la plus petite taille de matrice, on effectue la diagonalisation d'une matrice de dimension $n \times n$ (obtenue avec $\tilde{K}^T\tilde{K}$ dans notre cas) au lieu de $m \times m$. Les vecteurs singuliers (obtenus par décomposition de \tilde{K} en valeurs singulières) apportent des informations assez proches de celles fournies par les noyaux moyens (*cf. Chap. III.3.2*) et nous ne les discuterons pas ici. Pour un exemple d'utilisation des vecteurs singuliers nous renvoyons le lecteur à la thèse de Solène Turquety [\[TUR03\]](#).

Les racines carrées des valeurs propres de la matrice $\tilde{K}^T\tilde{K}$ sont les valeurs singulières λ_i de la matrice \tilde{K} . Elles permettent d'obtenir l'entropie informationnelle (3.17) du spectre en ayant pris en compte toutes les altitudes du profil sans distinction. Les λ_i donnent aussi accès au nombre d'informations indépendantes correspondant au nombre de valeurs singulières λ_i de \tilde{K} qui sont supérieures à un certain seuil ou proche de 1. Le nombre de degrés de liberté contenu dans le signal est défini par l'équation :

$$d_s = \sum_i d_{s_i} = \sum_i \frac{\lambda_i^2}{1 + \lambda_i^2} = \text{tr}(A) \quad (3.21)$$

Ce nombre de degrés de liberté est associé au spectre pris dans sa globalité et non à un point donné du spectre ou pour une altitude donnée d'un profil. En effet, la matrice carrée $\tilde{K}^T\tilde{K}$ de dimension n est symétrique et ses valeurs propres sont réelles, ce qui conduit à n valeurs λ_i distinctes (les n altitudes inversées). Mais il est impossible d'attribuer un λ_i à une altitude donnée.

Afin d'examiner plus en détail l'entropie informationnelle que peut apporter un seul paramètre (une altitude donnée) et de localiser spectralement d'où provient l'information la plus importante, une autre procédure a été étudiée en parallèle à la détermination des quantités H et d_s , qui fournissent une information globale.

En reprenant la matrice \tilde{K} , on rappelle que ses dimensions sont de n colonnes représentant les paramètres restitués et de m lignes qu'on doit faire correspondre au m nombre d'onde de la fenêtre considérée du spectre infrarouge. En considérant chacune des colonnes de la matrice \tilde{K} séparément (et donc en considérant un seul paramètre, numéroté k , parfaitement

identifié) et en effectuant le produit avec la transposée de ce vecteur colonne on obtient un scalaire correspondant à une valeur λ_k^2 pour laquelle on peut calculer une entropie informationnelle H_k relative à ce seul paramètre :

$$\lambda_k^2 = \tilde{K}_k^T \tilde{K}_k \quad (3.22)$$

Où \tilde{K}_k est le vecteur associé (vecteur colonne de \tilde{K}) au paramètre k .

$$H_k = \frac{1}{2} \log_2(1 + \lambda_k^2) \quad (3.23)$$

Pour avoir l'apport d'information d'un élément spectral il faut en principe effectuer le calcul de λ_k sur une portion de spectre qu'on incrémente point par point et faire la différence avec la valeur de l'entropie trouvée précédemment (*Annexe A.2*). On peut ainsi connaître l'entropie informationnelle qui est apportée par chaque nombre d'onde et cela en fonction de chaque paramètre, c'est-à-dire la concentration de l'espèce chimique étudiée à une altitude donnée. Il est à noter que la troisième propriété de H décrite par Shannon est toujours valable et qu'on peut l'écrire sous la forme :

$$H \leq \sum_{k=1}^n H_k \quad (3.24)$$

L'égalité n'est valable que s'il n'existe pas de corrélation entre les paramètres, ce qui n'est pas le cas au vu des résultats obtenus avec les noyaux moyens.

Pour illustrer l'apport d'information pour différentes espèces chimiques dans un spectre infrarouge on peut voir sur la figure III.28 le cas d'une fenêtre spectrale entre 2000 et 2200 cm^{-1} . En partant de 2000 cm^{-1} et en incrémentant le spectre point par point, on calcule à chaque fois la valeur de H pour une espèce chimique donnée. Cette valeur est retranchée à la valeur précédente mettant en évidence l'information qui est apportée (ΔH) par l'élément spectral qui est ajouté à chaque incrémentation. L'apport d'information pour une espèce chimique n'apparaît qu'à l'endroit où une de ses raies est présente dans le spectre. L'apport d'entropie informationnelle varie en fonction de l'efficacité des raies à nous fournir un supplément d'information sur l'espèce chimique considérée.

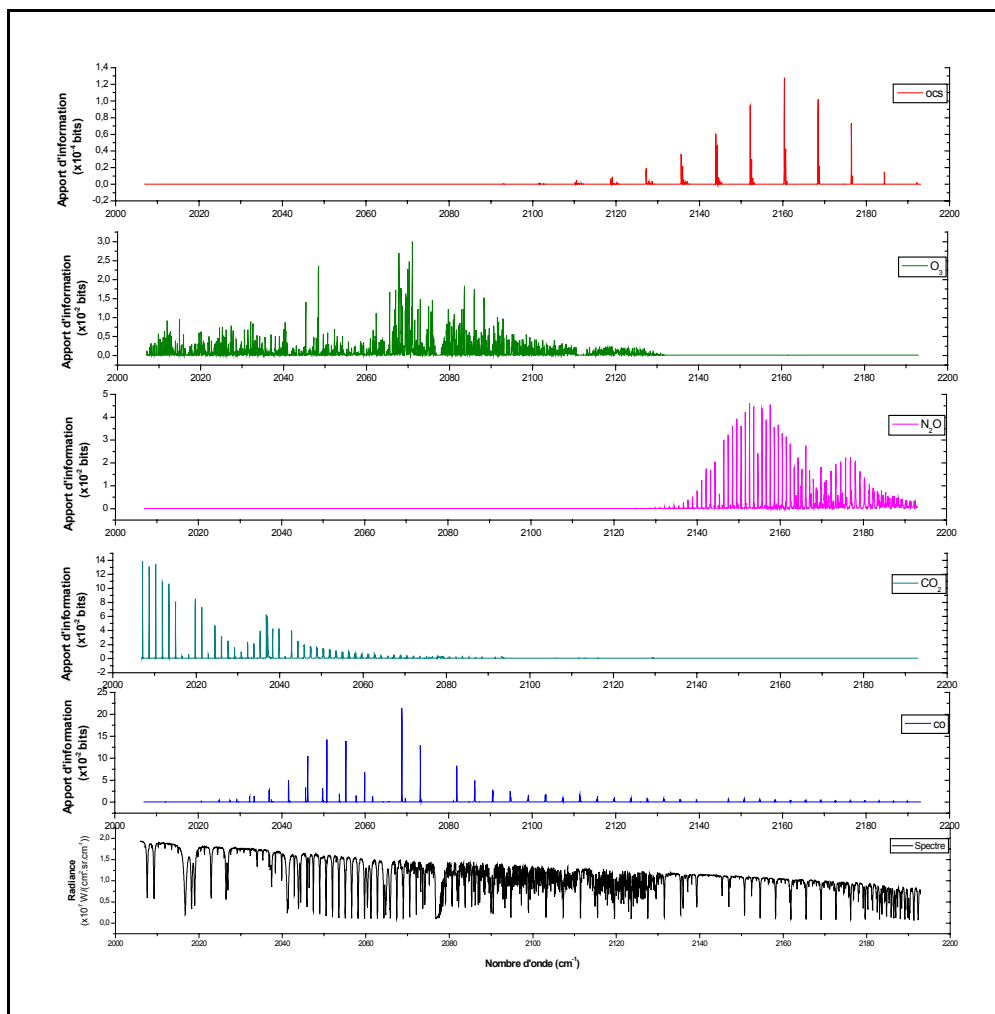


Figure III.28 : Apport d'information pour différentes espèces chimiques présentes dans la fenêtre comprise entre 2000 et 2200 cm^{-1} .

III.4.3 Nombre de degrés de liberté et information dans les profils d'ozone.

L'entropie informationnelle et le nombre de degrés de liberté ont été déterminés pour les spectres infrarouges entre 950 et 1100 cm^{-1} dans un premier temps en considérant la totalité de la fenêtre et en ne distinguant pas les différents paramètres que sont les rapports de mélanges aux différentes altitudes du profil d'ozone. C'est-à-dire que l'on effectue la décomposition en valeur singulière (SVD) sur la matrice \tilde{K} dans sa totalité. Les résultats sont présentés dans le tableau III.3. Le nombre de degrés de liberté correspond au nombre d'informations indépendantes pouvant être obtenues sur le profil afin d'optimiser la mesure et de diminuer l'incertitude sur la mesure. La SVD de \tilde{K} montre au plus 3 degrés de liberté. En parallèle une seconde détermination du degré de liberté (équation 3.18) par le biais de la trace de la matrice des noyaux moyens (de la figure III.20) nous donne un nombre de degrés de liberté égal à 3,179. On peut considérer avoir accès à 3 informations indépendantes qui pourraient être obtenues à partir du spectre. Les noyaux moyens et les fonctions de poids

ainsi que les tests sur l'inversion des profils nous ont conduit à n'en considérer que 2. On peut situer les niveaux correspondants dans la troposphère et dans la moyenne stratosphère avec, lors des inversions, de meilleures inversions du profil lorsqu'on utilise 2 niveaux de restitution plutôt que 3 niveaux. L'existence d'une information supplémentaire dans la détermination du nombre de degrés de liberté peut provenir du fait que dans le calcul de la matrice de gain (matrice G) ainsi que dans celui de la matrice \tilde{K} , la matrice covariance S_a employée est diagonale. On néglige donc les corrélations entre les paramètres lors de la détermination du nombre de degrés de liberté. La corrélation entre les paramètres reste difficile à estimer, mais cette hypothèse pourrait être vérifiée en considérant une corrélation en forme de distribution gaussienne. Nous n'avons pas pu effectuer ce test, car ceci nécessite une profonde modification de notre algorithme d'inversion. L'entropie informationnelle a été calculée et prend en compte l'information totale apportée sur la globalité de la fenêtre et qui combine toutes les altitudes du profil d'ozone.

i	λ_i	ds_i	H_i
1	43,648	0,99948	5,4482
2	7,5388	0,98266	2,9250
3	3,3666	0,91892	1,8123
4	0,61561	0,27483	0,23180
5	0,39561	0,13533	0,10489
6	0,12763	$1,6028 \cdot 10^{-2}$	$1,1655 \cdot 10^{-2}$
7	0,12427	$1,5208 \cdot 10^{-2}$	$1,1054 \cdot 10^{-2}$
8	0,054641	$2,9767 \cdot 10^{-3}$	$2,1504 \cdot 10^{-3}$
9	0,019879	$3,9502 \cdot 10^{-4}$	$2,8500 \cdot 10^{-4}$
10	$7,7423 \cdot 10^{-3}$	$5,9940 \cdot 10^{-5}$	$4,3239 \cdot 10^{-5}$
11	$7,2934 \cdot 10^{-3}$	$5,3191 \cdot 10^{-5}$	$3,8370 \cdot 10^{-5}$
12	$3,2153 \cdot 10^{-3}$	$1,0338 \cdot 10^{-5}$	$7,4572 \cdot 10^{-6}$
13	$2,0923 \cdot 10^{-3}$	$4,3776 \cdot 10^{-6}$	$3,1578 \cdot 10^{-6}$

14	$1,5245 \cdot 10^{-3}$	$2,3240 \cdot 10^{-6}$	$1,6764 \cdot 10^{-6}$
15	$1,1840 \cdot 10^{-3}$	$1,4018 \cdot 10^{-6}$	$1,0112 \cdot 10^{-6}$
16	$7,6494 \cdot 10^{-4}$	$5,8513 \cdot 10^{-7}$	$4,2208 \cdot 10^{-7}$
17	$4,8911 \cdot 10^{-4}$	$2,3923 \cdot 10^{-7}$	$1,7257 \cdot 10^{-8}$
18	$3,1704 \cdot 10^{-4}$	$1,0051 \cdot 10^{-7}$	$7,2506 \cdot 10^{-8}$
19	$2,3314 \cdot 10^{-4}$	$5,4353 \cdot 10^{-8}$	$3,9207 \cdot 10^{-8}$
20	$2,1746 \cdot 10^{-4}$	$4,7288 \cdot 10^{-8}$	$3,4111 \cdot 10^{-8}$
21	$1,8557 \cdot 10^{-4}$	$3,4436 \cdot 10^{-8}$	$2,4841 \cdot 10^{-8}$
22	$1,5002 \cdot 10^{-4}$	$2,2505 \cdot 10^{-8}$	$1,6234 \cdot 10^{-8}$
23	$5,9723 \cdot 10^{-5}$	$3,5669 \cdot 10^{-9}$	$2,5730 \cdot 10^{-9}$
24	$2,8753 \cdot 10^{-5}$	$8,2674 \cdot 10^{-10}$	$5,9637 \cdot 10^{-10}$
TOTAL:		3,3460	10,547

Tableau III.3 : Nombre de degrés de liberté et entropie informationnelle obtenus par décomposition

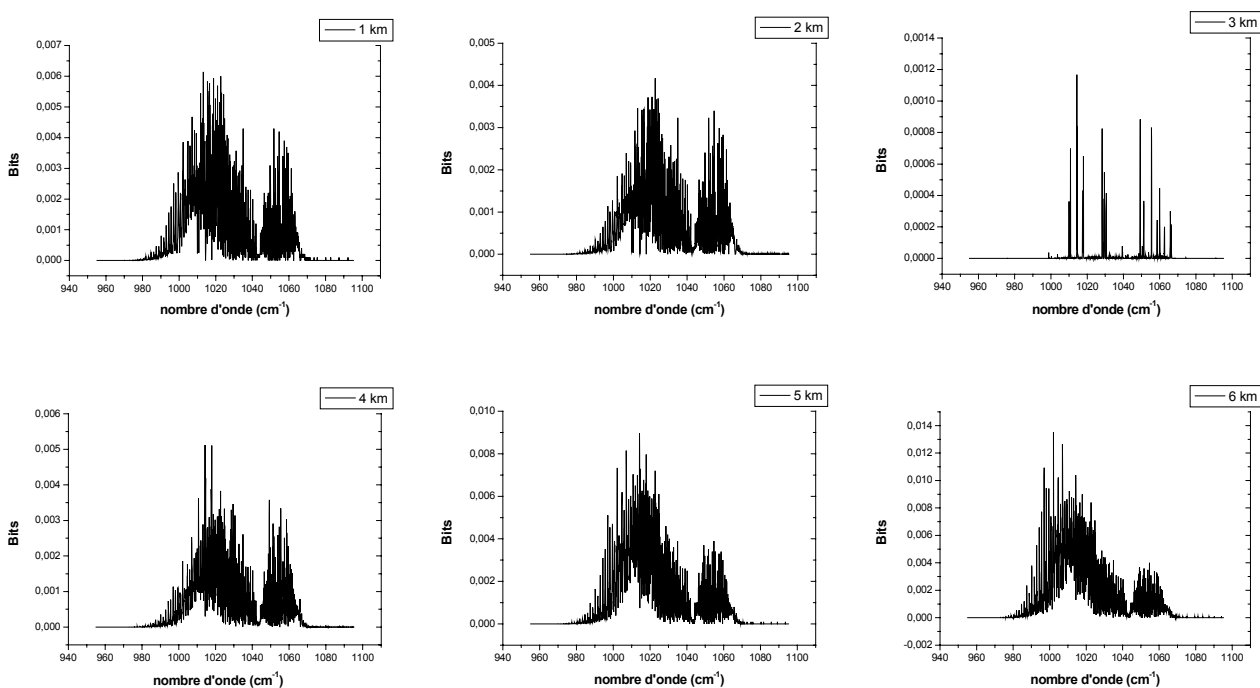
en valeurs singulières λ_i de la matrice \tilde{K} , avec : $d_{s_i} = \frac{\lambda_i^2}{1 + \lambda_i^2}$ et $H_i = \frac{1}{2} \log_2(1 + \lambda_i^2)$

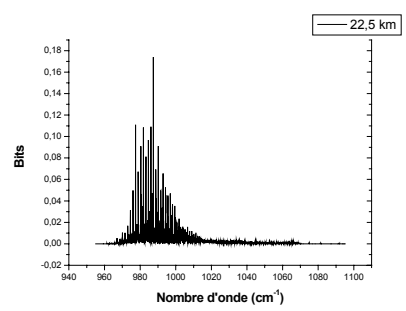
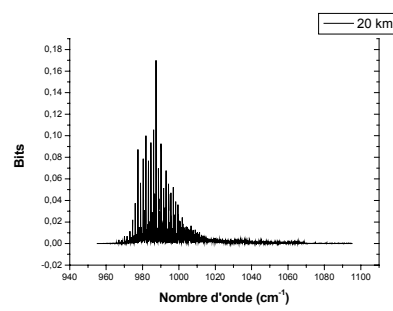
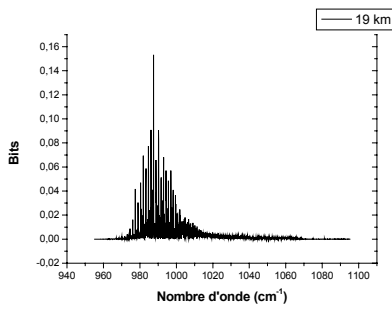
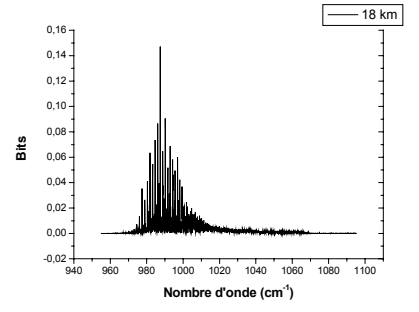
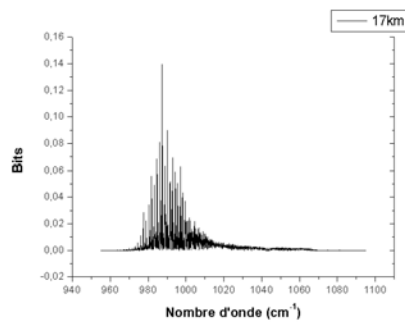
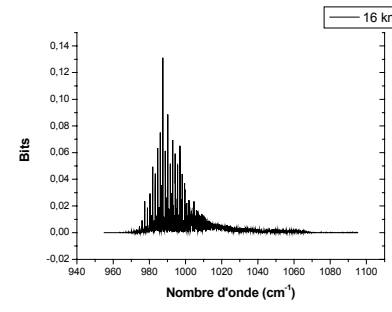
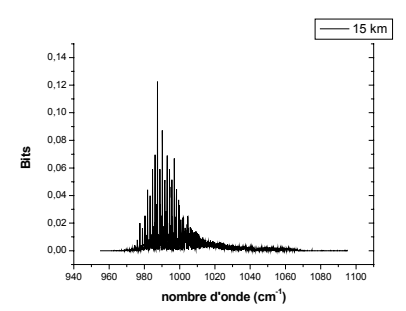
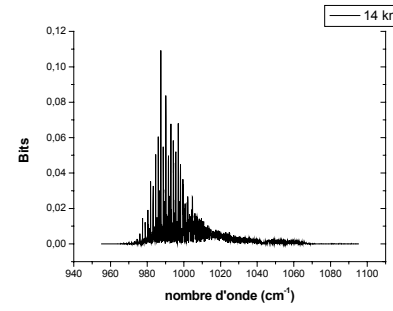
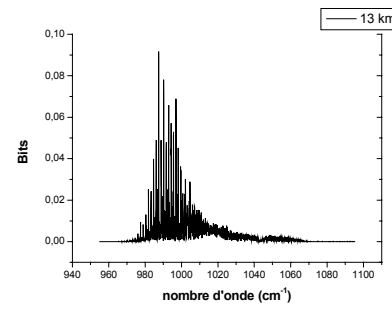
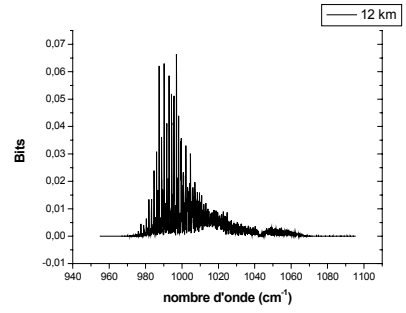
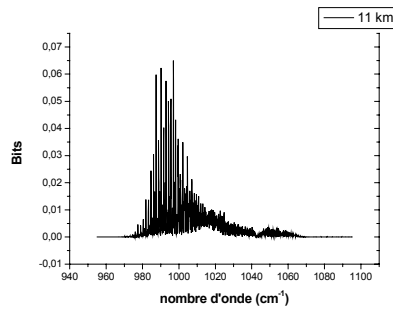
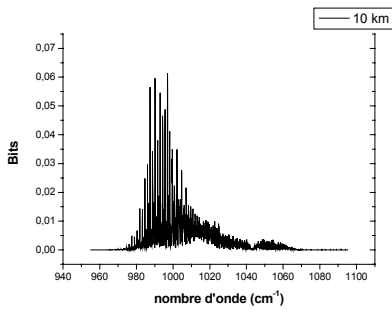
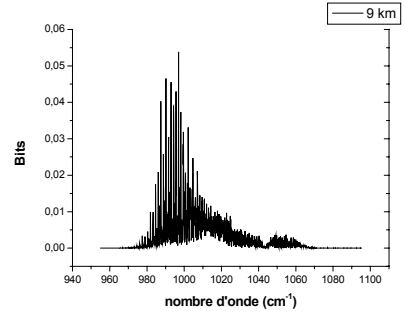
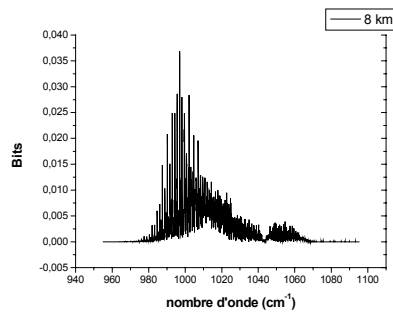
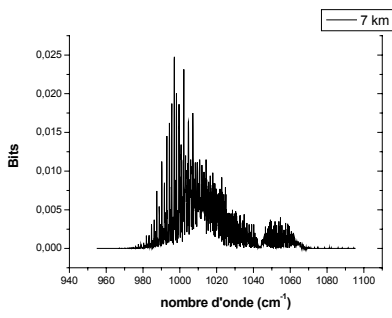
L'entropie informationnelle H définie par l'équation (3.17) a pour valeur 10,55 bits ce qui correspond à $2^{10,55} \approx 1499$ profils d'ozone différents qu'on peut distinguer. Cette valeur ne nous apporte que peu de renseignements puisque nous n'avons pas de référence avec laquelle nous pouvons la comparer. En effectuant la différence entre deux valeurs calculées de H le long d'une fenêtre, on peut évaluer l'apport d'entropie ou l'apport d'information lorsqu'on agrandit la fenêtre point par point. De plus, en déterminant les λ_{param} à partir de chaque colonne de \tilde{K} , correspondant à chaque paramètre que l'on ajuste, on peut analyser cet

colonne de \tilde{K} , correspondant à chaque paramètre que l'on ajuste, on peut analyser cet apport pour chaque altitude distincte du profil d'ozone. La figure III.29 montre l'apport d'information de chaque niveau du profil vertical d'ozone sur tout le domaine spectral 950 - 1100 cm^{-1} .

Pour chaque altitude du profil d'ozone, on peut voir l'apport en information qui est ajouté à chaque fois qu'on incrémente le spectre en partant de 950 cm^{-1} vers les nombres d'onde croissants. On peut par exemple observer que pour toutes les altitudes, dans la partie de la fenêtre en dessous de 970 cm^{-1} , l'information est quasi nulle. Ceci est dû à la faible intensité des raies d'ozone dans cette partie du spectre et à l'existence de raies d'espèces chimiques différentes qui brouillent l'information que pourraient fournir les raies d'ozone dans cette région spectrale. Cela revient à dire qu'étant donnée le peu d'information (quelque soit l'altitude) la région comprise entre 950 et 970 cm^{-1} ne permet pas à elle seule la détermination de profils d'ozone. Hormis pour 3 km où il n'y a que très peu d'information accessible à cette altitude on observe que l'apport d'entropie informationnelle peut se classer en deux catégories. Une catégorie regroupe les altitudes dans la troposphère en dessous de 8 - 9 km environ et une catégorie regroupe les altitudes situées dans la basse stratosphère.

Dans la troposphère on observe que l'information est faible et répartie sur toute la fenêtre, là où il y a des raies d'ozone. On peut voir que pour les basses altitudes, l'information sur l'ozone est relativement faible et qu'il est besoin de considérer toute la fenêtre pour accéder au maximum d'information accessible à ces altitudes. Une fenêtre plus petite limiterait la détermination des rapports de mélange à basse altitude ou en diminuerait la précision.





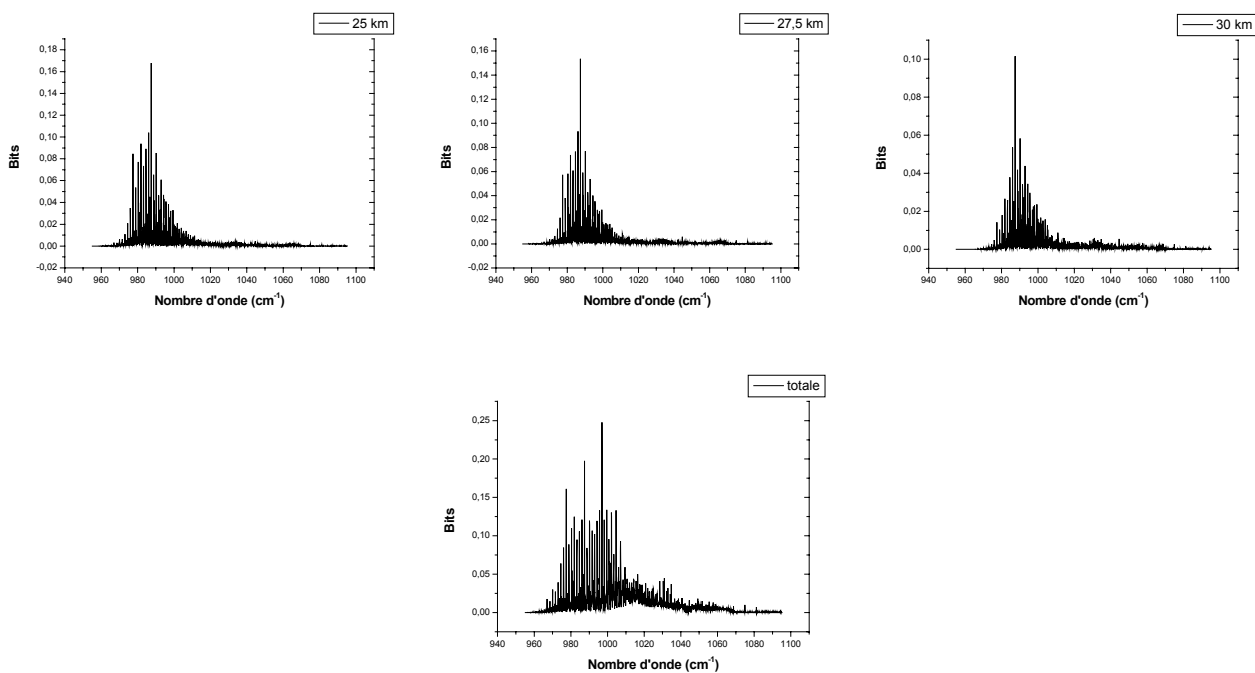


Figure III.29: Information apportée par chaque paramètre d'altitude du profil d'ozone sur chaque nombre d'onde de la micro-fenêtre 950-1100 cm^{-1} .

L'entropie informationnelle, apportée par les altitudes situées dans la partie stratosphérique du profil, est relativement plus importante que dans la partie troposphérique. De plus l'information n'est plus répartie de manière homogène sur la fenêtre mais plus localement sur les « premières » raies d'ozone qui apparaissent lors du calcul de l'entropie (on incrémente le spectre en partant de 950 vers 1100 cm^{-1}). Cela nous amène à dire que pour les altitudes situées dans la stratosphère, l'information recherchée est contenue dans une micro-fenêtre plus petite que celle que nous utilisons. On remarque que le maximum d'information se trouve entre 980 – 1000 cm^{-1} . Le reste de la fenêtre joue alors pour ces altitudes le rôle de redondance dans l'information. Il n'est pas indispensable de considérer toutes les raies de la fenêtre pour pouvoir déterminer, lors de l'inversion, le profil vertical de l'ozone aux altitudes « élevées » à partir du traitement des spectres infrarouges IASI02.

Si l'on veut déterminer le profil vertical d'ozone, il est tout de même préférable de considérer toute la fenêtre afin d'avoir accès au maximum d'information dans les niveaux les plus bas. Comme le montre le dernier graphique de la figure III.29, même si l'information est plutôt contenue dans la partie spectrale 940-1040 cm^{-1} il existe un apport plus faible mais non négligeable dans la région entre 1040 et 1100 cm^{-1} . En considérant la fenêtre dans sa totalité on augmente l'information à laquelle on a accès lors de l'inversion et par la même occasion la possibilité de mieux reproduire le profil d'ozone dans sa partie basse.

III.5 Comparaison des inversions entre les spectres à la résolution IASI-ballon et les spectres « IASI-like »

III.5.1 Dégradation des spectres IASI-ballon à la résolution de IASI/MetOp.

Les spectres dans l'infrarouge thermique obtenus par l'instrument TF IASI-ballon ont une résolution de $0,1 \text{ cm}^{-1}$ apodisée. Les spectres enregistrés sont « vus » à travers l'instrument et donc tiennent compte de la fonction d'appareil. Pour réaliser des spectres semblables à ceux de l'instrument IASI (spectres « IASI-like ») on utilise ceux obtenues au cours du vol IASI02 sur lesquels on applique une transformation adéquate.

Les spectres « IASI-like » doivent tenir compte de la fonction théorique de l'instrument IASI qui s'apparente à une fonction gaussienne mais présente de légères oscillations au niveau des pieds de la fonction (Fig. III.30). Les spectres calculés à résolution infinie convolués par la fonction de réponse spectrale de l'instrument IASI (ISRF) permettent l'obtention des spectres IASI à la résolution de $0,5 \text{ cm}^{-1}$ apodisée (spectre de niveau 1c). Nous avons utilisé les spectres de IASI02 afin générer des spectres de situations réelles tout en reproduisant au mieux les spécificités des spectres du futur instrument IASI.

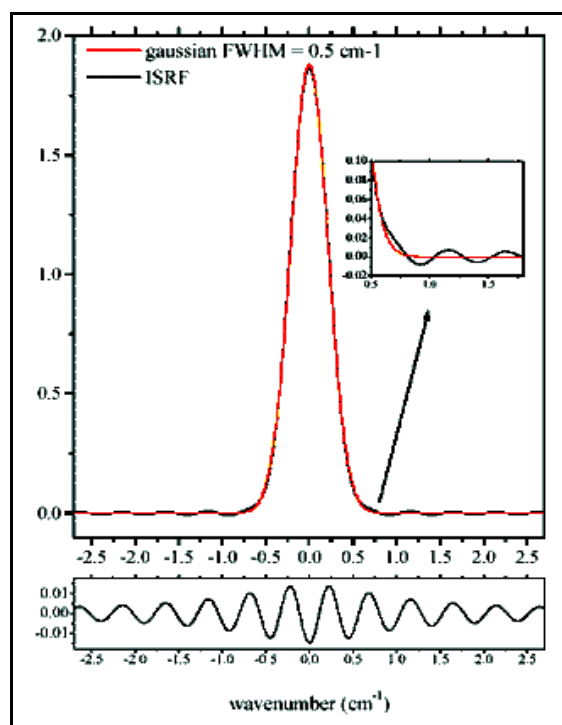


Figure III.30 : Fonction de réponse spectrale de l'instrument IASI (ISRF) comparée à une gaussienne ayant une demi-largeur à mi-hauteur (FWHM) de $0,5 \text{ cm}^{-1}$. La courbe en dessous montre la différence entre les ISRF. Cette fonction doit être convoluée au spectre à résolution infinie pour obtenir un spectre en radiance « IASI-like ».

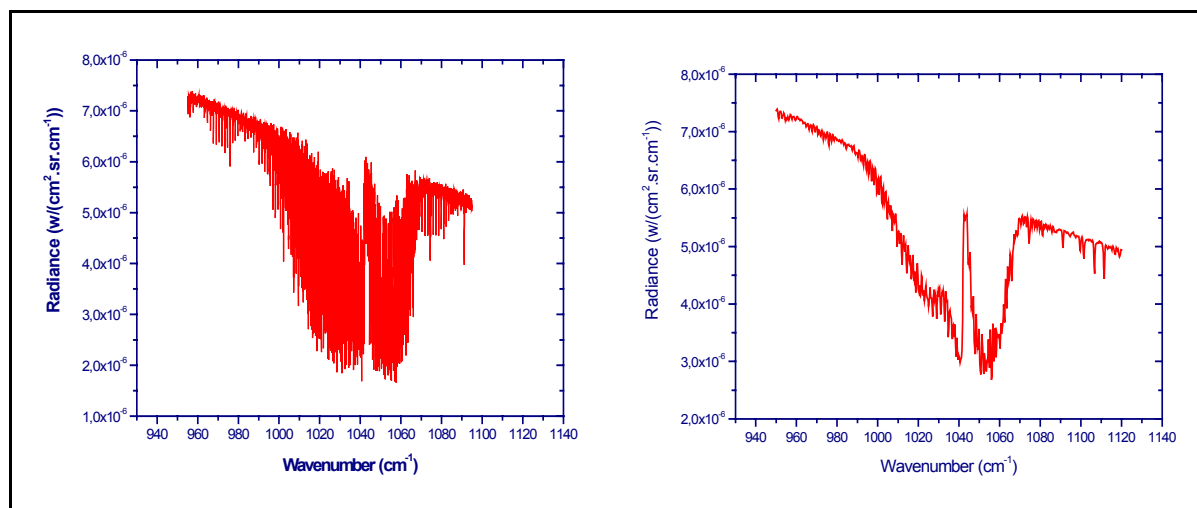


Figure III.31 : Exemple de spectre en émission thermique pour la région de la bande de l'ozone à 10 μm obtenu par IASI-ballon (figure de gauche) et le même spectre après dégradation à la résolution spectrale de IASI/MetOp (figure de droite).

Pour l'obtention des spectres à la résolution IASI, on effectue une convolution du spectre à la résolution IASI-ballon avec une fonction gaussienne dont la largeur à mi-hauteur est définie de manière à ce que le spectre résultant de la convolution ait les caractéristiques d'un spectre ayant été convolué par la réponse de l'instrument IASI/MetOp. Ces spectres sont appelés spectres « IASI-like » (Fig. III.31).

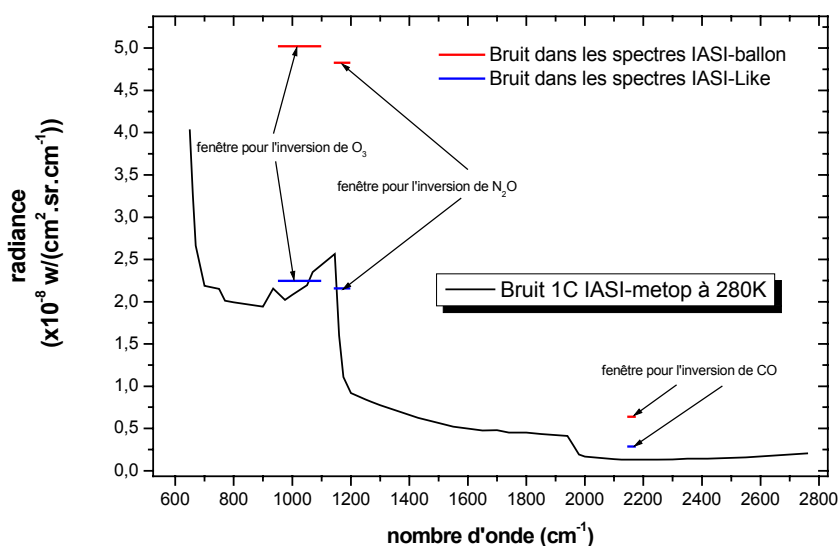


Figure III.32 : Bruit théorique de IASI/MetOp et bruits obtenus pour les spectres IASI02 et IASI-like dans des fenêtres couvrant chaque détecteur de IASI.

Afin de nous assurer que les spectres « IASI-like » ainsi obtenus sont proches de la réalité des spectres attendus avec l'instrument IASI, nous avons comparé les bruits en radiance

dans différentes fenêtres couvrant chaque détecteur de l'instrument IASI (*Fig. III.32*) et comparé avec le bruit théorique attendu pour l'instrument. On peut considérer que le bruit déterminé sur les spectres IASI-ballon après une dégradation spectrale à la résolution de IASI/MetOp est atténué d'un facteur $\sqrt{5}$. On observe que les bruits des spectres « IASI-like » est en assez bon accord avec le bruit théorique de l'instrument excepté dans la troisième bande de IASI (2000 - 2760 cm^{-1}) où nos spectres issus du vol IASI02 sont plus bruités.

En fait le détecteur MCT de IASI-ballon couvre les 2 premières régions de IASI et la troisième région de IASI est couverte par le détecteur InSb de IASI-ballon (*cf. I.4.1 et I.4.3*). Lors de l'enregistrement des spectres du vol IASI02, l'ouverture pour le second détecteur a été plus petite que celle choisie pour le premier vol, ce qui entraîne une diminution du nombre de photons arrivant sur le détecteur et donc un bruit plus important

On peut tout de même considérer que les spectres « IASI-like » obtenus après dégradation spectrale des spectres de IASI02 permettent d'avoir un échantillon de spectres dont les caractéristiques reproduisent les spectres qu'on peu attendre de l'instrument IASI/MetOp.

A partir des inversions des spectres « IASI-like » dans la région de l'ozone à 10 μm il est dès lors possible de comparer les résultats obtenus avec les résultats de ces mêmes spectres sans dégradation spectrale. On peut ainsi tester nos capacités à traiter les spectres IASI et voir l'impact de la diminution de la résolution spectrale.

III.5.2 Ajustement des spectres à la résolution dégradée de IASI/MetOp

Les noyaux moyens déterminés à partir des spectres « IASI-like » confirment (*Fig. III.20*) les observations faites pour les spectres IASI02 à la résolution de 0,1 cm^{-1} . On trouve à nouveau 2 niveaux de restitution pour les profils. La dégradation spectrale a tout de même atténué l'intensité des noyaux moyens.

La résolution verticale a augmenté d'environ 4 km en moyenne passant ainsi de valeurs entre 4 et 10 km à des valeurs entre 8 et 14 km. De même, là où à la résolution de IASI-ballon on pouvait voir 3 ensembles de noyaux distincts, à la résolution « IASI-like » l'ensemble qui se situait entre 10 et 20 km s'est fondu dans les 2 autres groupes (entre 7 et 17 km pour le premier et entre 20 et 30 km pour le second). On a donc une perte de « sensibilité » avec les spectres dégradés à la résolution de IASI/MetOp. Mais les pics les plus intenses des noyaux moyens se retrouvent dans les mêmes zones d'altitudes, c'est-à-dire autour de 10 km et de 20 km. Nous

avons donc considéré, lors des inversions des spectres à la résolution IASI/MetOp, les 2 mêmes niveaux de restitution (6 et 19 km).

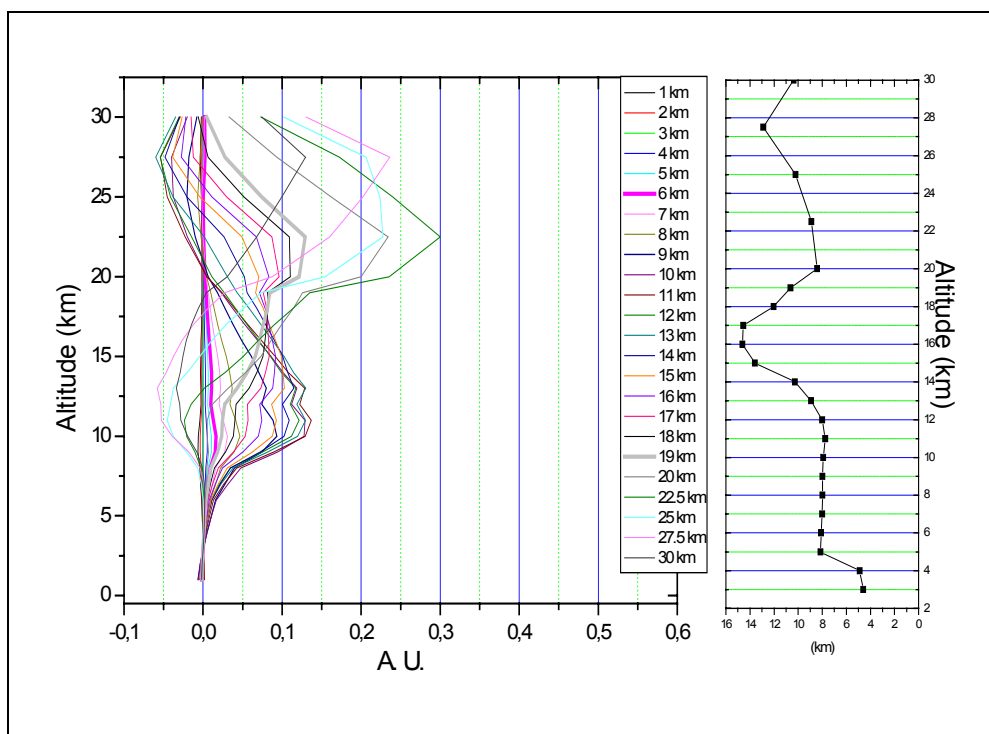


Figure III.33: Noyaux moyens obtenus pour le profil d'ozone en utilisant la base spectroscopique MIPAS pour l'inversion de spectre à la résolution de IASI/MetOp. Chaque noyau correspond à une altitude de restitution du profil d'ozone. A droite on a tracé en fonction de chaque altitude de restitution la largeur à mi-hauteur du pic du noyau moyen correspondant.

L'emploi de 2 niveaux de restitutions à 6 et 19 km lors de l'ajustement des spectres permet d'obtenir un bon accord entre spectres calculés et spectres « IASI-like » (Fig. III.34). Les résidus en température sont en dessous de 1 K, c'est-à-dire meilleurs que les résidus à la résolution de IASI-ballon, mais il faut garder à l'esprit que le bruit après dégradation spectrale a lui aussi été atténué. On ne peut donc pas juger de la qualité des ajustements entre les 2 différentes résolutions en ne comparant que le résidu. Mais on peut noter que le résidu en radiance est en moyenne de $3,9 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1})$, qu'on peut comparer à la valeur du bruit en radiance déterminé pour les spectres à la résolution IASI-like pour la région de $950 - 1100 \text{ cm}^{-1}$, soit $2,25 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1})$. Ces deux résultats sont de très bonne qualité.

Le choix de 2 niveaux de restitution à 6 et 19 km d'altitude dans le profil d'ozone semble permettre un bon ajustement des spectres dégradés en résolution spectrale. On peut ainsi en gardant les mêmes niveaux comparer les résultats obtenus à la résolution IASI-ballon et à la résolution « IASI-like » pour les colonnes et les profils afin d'estimer notre capacité à sonder l'ozone à partir de spectres de qualité équivalente à ceux de l'instrument IASI/MetOp.

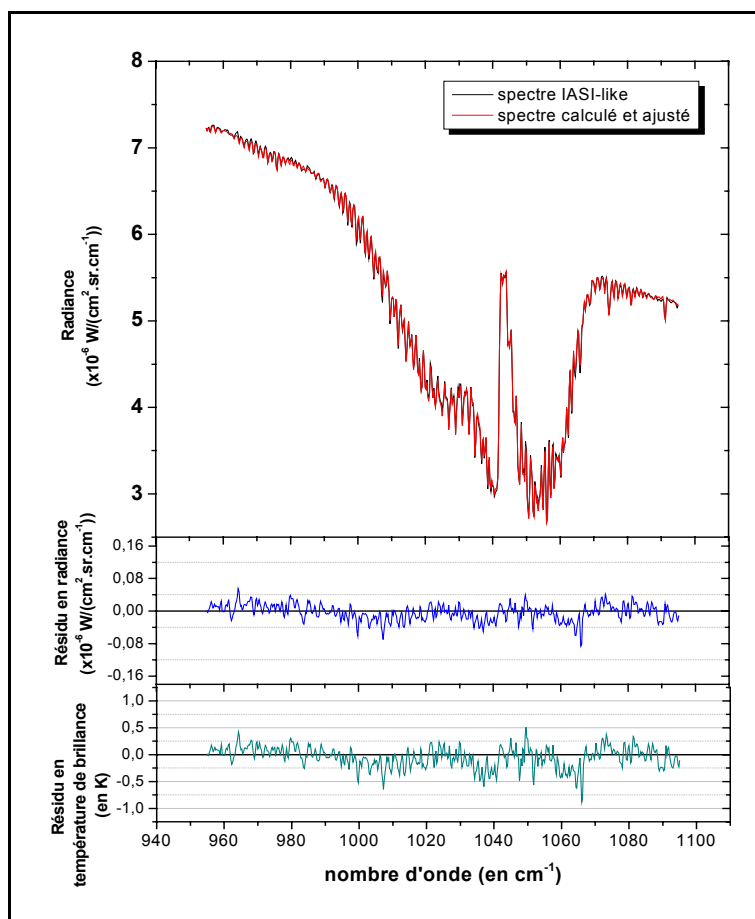


Figure III.34: Exemple d'ajustement de spectre « IASI-like » avec en dessous les différences entre spectre calculé et spectre « IASI-like » en radiance et en température de brillance.

III.5.3 Comparaison entre « IASI-like » et IASI-ballon

L'inversion des spectres « IASI-like » a été effectuée avec le même mode opératoire que lors du traitement des spectres IASI02. Les profils restitués pour l'ozone sont présentés dans la figure III.34. Tout comme pour les spectres IASI02, le profil moyen et l'écart quadratique ont été calculés afin de juger de la qualité des profils restitués.

L'estimation de l'erreur sur les profils obtenus correspond donc à un intervalle de confiance d'environ 68%. En comparant les profils inversés avec les spectres « IASI-like » (*Fig. II.35*) avec ceux inversés avec les spectres IASI02 (*Fig. III.24*), on constate un assez bon accord. Les profils restitués à partir de spectres dégradés en résolution montrent un rapport de mélange légèrement plus important dans la partie stratosphérique des profils. On reste tout de même en très bon accord avec le sondage effectué le jour du vol IASI02. Le fait que l'on soit à des altitudes où les pressions totales sont faibles, font qu'une différence de 0,6 ppmv par exemple sur le profil moyen à 28 km n'influence que très peu la quantité globale d'ozone contenue dans

la colonne. Une dégradation de la résolution spectrale a pour conséquence une moins bonne détermination de la distribution verticale des constituants chimiques, mais au vu des profils inversés pour O₃ on peut considérer que l'on arrive à une précision satisfaisante.

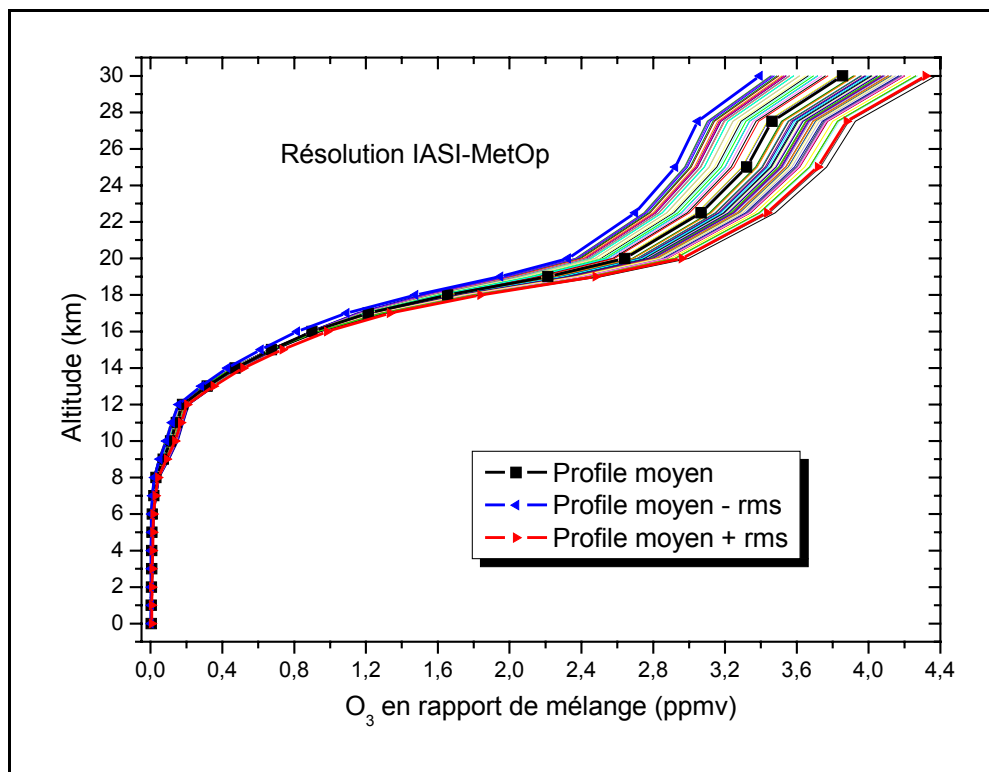


Figure III.35: Ensemble des profils d'ozone inversés à partir des spectres IASI02 à la résolution « IASI-like » avec deux altitudes de restitution à 6 et 19 km.

La comparaison des colonnes totales (entre 0 et 25 km) obtenues pour les deux résolutions confirme le bon accord trouvé lors de la restitution des profils (*Fig. III.36*). En considérant les barres d'erreurs, on estime que l'inversion des spectres « IASI-like » ($0,5 \text{ cm}^{-1}$) nous donne les mêmes colonnes totales que celles obtenues à partir des spectres à la résolution IASI-ballon ($0,1 \text{ cm}^{-1}$). En supposant que les colonnes totales trouvées pour les spectres IASI-ballon sont correctes, les colonnes d'ozone pour les spectres « IASI-like » sont déterminées avec une erreur d'environ 1 à 5 %. Cela correspond bien à l'incertitude sur la colonne totale d'ozone qui est attendue pour le produit de l'instrument IASI/MetOp.

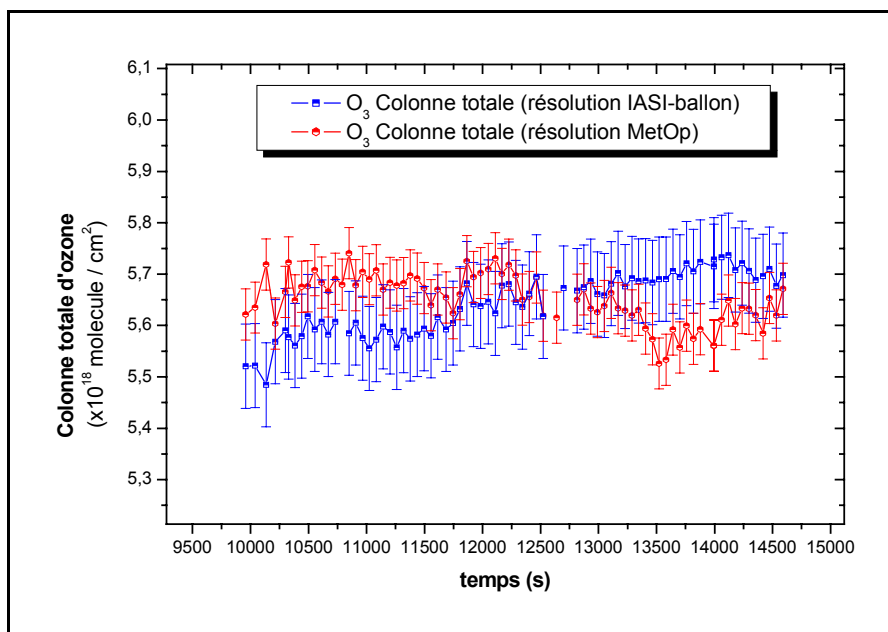


Figure III.36: Colonnes totales obtenues à partir des spectres IASI02 à la résolution spectrale IASI-ballon et IASI/MetOp.

L'analyse de l'apport d'entropie informationnelle pour chaque altitude en fonction du nombre d'onde sur les spectres « IASI-like » (*Annexe A.3*) montre une répartition différente de l'information par rapport à celle trouvée à partir des spectres à la résolution IASI-ballon.

On peut faire une première observation : l'information est plus faible pour les spectres à résolution dégradée. Une plus faible entropie informationnelle pour les spectres « IASI-like » montre que pour un même « message » (la colonne ou le profil d'ozone) qu'on recherche à « décoder » à travers les spectres infrarouges, il est plus difficile d'avoir une certitude sur la solution du problème inverse. Tout se passe comme si le manque d'information entraînait une incertitude plus grande sur la détermination de la solution. Cela peut expliquer les écarts entre les résultats trouvés pour la résolution IASI-ballon et ceux à la résolution de IASI/MetOp.

La répartition spectrale de l'apport d'information diffère aussi. Ceci montre que le choix des fenêtres ou micro-fenêtres peut être conditionné par la résolution spectrale disponible. Dans le cas des spectres « IASI-like » l'information est répartie sur toute la fenêtre contrairement à la résolution IASI-ballon où l'information est plus localisée sur une plus faible portion du spectre où les raies d'ozone sont présentes.

La dégradation spectrale à la résolution de IASI/MetOp permet d'établir l'impact sur l'information restituable d'une modification de la résolution spectrale. D'un point de vue du calcul, la détermination de l'information spectrale reste très exigeante en ressource informatique, mais elle permet de sélectionner et éventuellement de réduire la taille des fenêtres. Dans le cas de l'ozone la distribution de l'entropie informationnelle est telle que nous

considérons toute la fenêtre afin d'avoir un maximum d'entropie. Les figures de l'annexe A.2 montrent que cela est d'autant plus nécessaire dans le cas de spectres à la résolution de IASI/MetOp. Pour des algorithmes opérationnels où l'on se limite à quelques points du spectre lors des inversions, l'entropie informationnelle a l'avantage de permettre de déterminer les points qui seront les plus à même de fournir la plus grande sensibilité, ce qui sera déterminé par la valeur de l'apport entropie informationnelle.

III.6 Conclusion

Ce chapitre a permis d'introduire une nouvelle méthodologie dans l'analyse de sensibilité du profil vertical d'une espèce chimique sur le spectre infrarouge thermique. Les fonctions de poids, les noyaux moyens ainsi que le nombre de degrés de liberté et l'entropie informationnelle sont des outils mathématiques qui ont été introduits dans l'algorithme d'inversions de spectres.

Les résultats obtenus sur les profils verticaux d'ozone montrent que la base spectroscopique MIPAS pour l'ozone apporte une amélioration dans l'ajustement des spectres par rapport à la base HITRAN 2000. Le nombre plus important de raies et une intensité des raies corrigée d'environ 4% montrent que les résidus sont sensiblement plus faibles. HITRAN 2004 intègre maintenant les paramètres de la base spectroscopique de MIPAS.

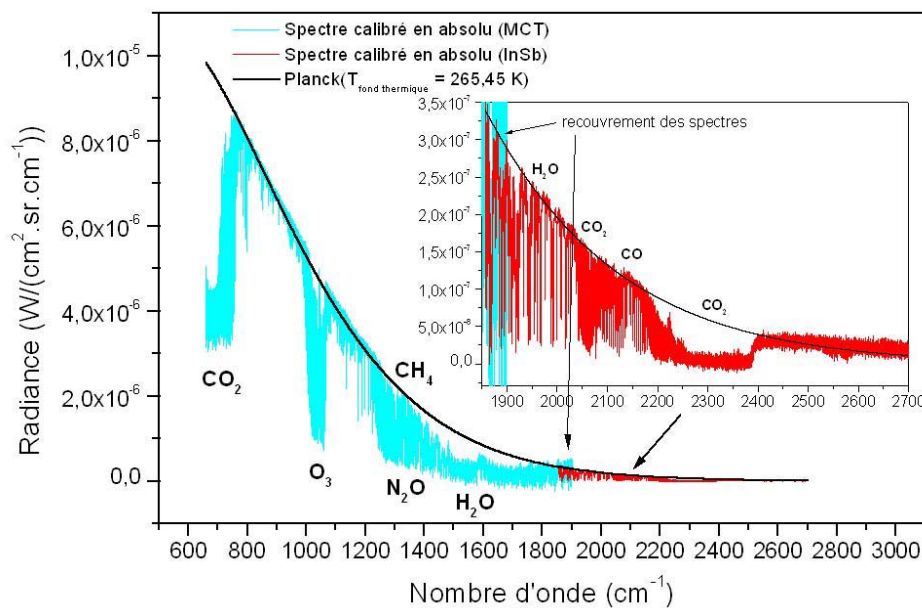
Les profils ainsi restitués utilisent deux niveaux de restitution. Leur altitude a été déterminée à l'aide des fonctions de poids et des noyaux moyens. On montre un très bon accord entre le sondage ozone et les profils inversés. Une altitude dans la troposphère (6 km) et une altitude dans la stratosphère (19 km) semblent être le meilleur choix pour obtenir une bonne restitution des profils.

La détermination du nombre de degrés de liberté ainsi que de l'entropie informationnelle spectrale, dans l'algorithme LARA, semble donner des résultats qui concordent avec ceux trouvés à l'aide des noyaux moyens. On peut ainsi visualiser la distribution de l'information dans une fenêtre et voir quelle est la contribution apportée par chaque couche atmosphérique. Il est possible dès lors d'effectuer une meilleure sélection des régions spectrales à étudier.

Nous avons enfin pu générer des spectres « IASI-like » qui reproduisent bien les caractéristiques spectrales escomptées pour les spectres de l'instrument satellitaire IASI. Il est possible avec notre algorithme scientifique de traiter les spectres ainsi dégradés. Les résultats

obtenus pour les colonnes totales d'ozone ont une précision équivalente à la précision attendue pour les produits déduits des mesures IASI. Ceci permet d'affirmer que l'instrument IASI avec les performances annoncées en terme de résolution spectrale et de bruit radiométrique peut atteindre ses objectifs concernant la précision attendue sur la colonne de O₃.

*Exemple de spectre atmosphérique calibré mesuré
durant le premier vol IASI-Ballon au-dessus de la
Suède en mars 2001*



CHAPITRE IV

Sondage de molécules d'intérêt atmosphérique dans différentes fenêtres spectrales

Les spectres infrarouges enregistrés au cours du second vol IASI-ballon ont permis l'étude de plusieurs espèces chimiques dans différentes fenêtres ou micro-fenêtres. Les espèces chimiques auxquelles nous nous sommes intéressés sont des molécules dont l'instrument IASI doit fournir les colonnes totales. Afin de prévoir les performances et la qualité des futurs produits, l'inversion des spectres et la restitution des colonnes totales ont été faites à la résolution de l'instrument IASI-ballon ainsi qu'à la résolution IASI/MetOp. Enfin pour effectuer une comparaison de calcul de transfert radiatif par différents algorithmes dans plusieurs laboratoires nous avons mis en place le second exercice d'intercomparaison de calcul

raie par raie (LIE) pour des spectres provenant de différents instruments. Le LIE-2 a pour objectif l'intercomparaison des codes de calcul raie par raie de différents groupes de recherche impliqués dans le projet IASI. On pourra mettre l'accent sur les points qu'il est éventuellement possible d'améliorer ou d'approfondir dans le cadre du futur traitement des spectres IASI.

IV.1 Fenêtre 1145 - 1195 cm^{-1}

IV.1.1 Ajustement des spectres infrarouges IASI02

Le protoxyde d'azote N_2O est une molécule d'intérêt atmosphérique. Comme nous l'avons vu dans le chapitre I cette molécule fait partie des gaz à effet de serre mais c'est aussi une espèce source pour les oxydes d'azote dans la stratosphère. La région spectrale que l'on utilise généralement pour la détermination de N_2O dans l'infrarouge thermique se situe entre 1145 et 1195 cm^{-1} .

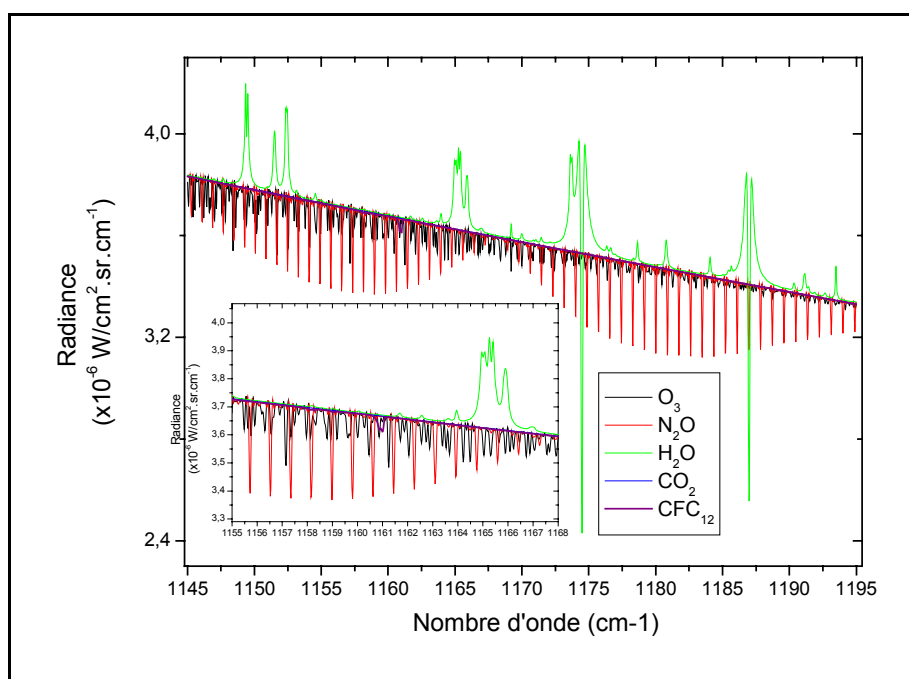


Figure IV.1 : Simulation des différentes contributions spectrales de O_3 , N_2O , H_2O , CO_2 , et CFC-12 dans la fenêtre 1145 – 1195 cm^{-1} .

Hormis la vapeur d'eau dont les raies ont une absorption intense, les autres espèces présentes dans la fenêtre 1145 - 1195 cm^{-1} ont des signatures spectrales faibles mais permettent une visualisation assez nette des raies de N_2O (Fig. IV.1). Vers 1161 cm^{-1} , on observe bien la contribution de l'espèce chimique CFC-12, ce qui nous amène à la prendre en compte dans la

simulation des spectres, mais le bruit des spectres rend difficile une inversion de la colonne de CFC-12 dans cette région spectrale.

L'ajustement des spectres IASI02 dans cette région fait apparaître des résidus faibles inférieurs à 1 K en température de brillance et inférieurs à 2 % en radiance (*Fig. IV.2*). Des problèmes subsistent quant à l'ajustement des raies de vapeur d'eau pouvant provenir des incertitudes sur les largeurs et les intensités dans la base spectroscopique HITRAN 2000 ou d'incertitudes sur le profil vertical de température.

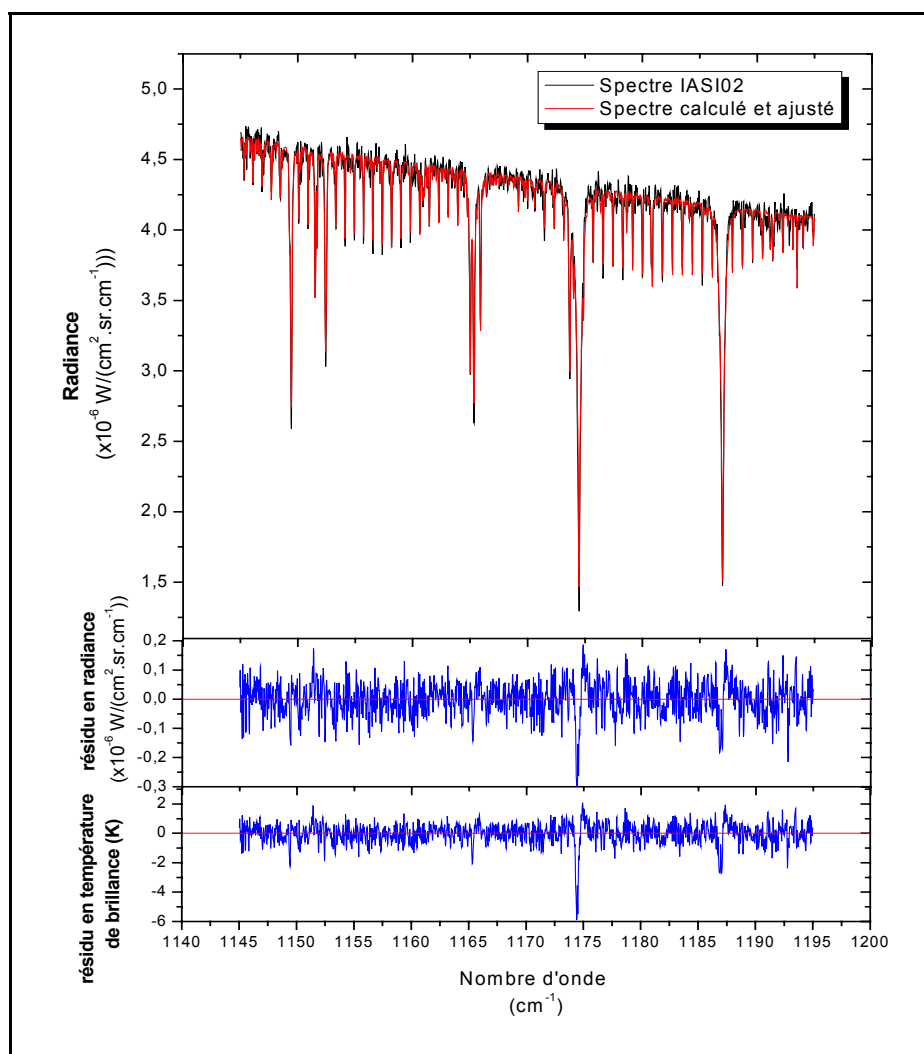


Figure IV.2 : Exemple d'ajustement de spectre IASI02 dans la fenêtre 1145 – 1195 cm^{-1} avec en dessous les résidus en radiance et en température de brillance.

L'ozone présent dans la fenêtre contribue à l'ensemble de cette région spectrale, mais avec des intensités relativement faibles par rapport à la vapeur d'eau et à N_2O . Le profil d'ozone qui est pris en compte ici est fixé et prend la valeur du profil moyen qui a été déterminé lors des inversions de la fenêtre 950 – 1100 cm^{-1} (*cf. chap. III.3*). On fixe ainsi une

valeur pour l'ozone qui nous semble meilleure que celle qui aurait été déterminée avec les raies relativement faibles de la fenêtre considérée. La valeur de CO₂ est, elle aussi, fixée lors des simulations des spectres car les raies correspondantes sont très faibles. Il est donc difficile d'ajuster la colonne de CO₂ à partir de l'information présente dans cette fenêtre. On a supposé un rapport de mélange de 370 ppm tout le long du profil entre le sol et 30 km ce qui correspond à une colonne de CO₂ d'environ $7,30 \cdot 10^{21}$ molécule.cm⁻².

IV.1.2 L'information sur le protoxyde d'azote.

Lors des inversions de N₂O nous avons cherché à exploiter au maximum l'information accessible dans la fenêtre 1145 – 1195 cm⁻¹ afin de voir s'il nous était possible d'établir un profil vertical de N₂O et avec combien de degré de liberté dans le profil.

L'apport d'entropie informationnelle spectrale a été calculé en effectuant une incrémentation spectrale en partant de 1140 cm⁻¹ vers 1195 cm⁻¹ pour un spectre IASI02. Celle-ci montre (*Fig. IV.3*) que, pour N₂O, on a une distribution de l'information sur toute la fenêtre avec une contribution plus importante dans les premières raies rencontrées lors du calcul de l'entropie. Cela vient principalement du fait que l'on commence à calculer H dans cette région. La valeur de l'entropie H_s nous donne $2^6 = 64$ cas atmosphériques distincts pour le profil de N₂O. Le degré de liberté d_s est d'environ 2 et, on peut envisager dans ce cas d'accéder à assez d'information pour envisager l'inversion d'un « profil » avec 2 altitudes de restitution.

D'un point de vue de la sélection des raies et de la limitation du domaine spectral « utile » à l'inversion, la Figure IV.3 montre qu'on n'a pas véritablement de région où il y aurait redondance de l'information. On pourrait envisager que la région entre 1165 – 1170 cm⁻¹, qui est « pauvre » en information, ne soit pas considérée dans l'inversion, mais le gain en temps de calcul reste minime dans notre cas. Pour un algorithme scientifique, il est préférable d'avoir un maximum d'entropie informationnelle et de n'être limité que par la capacité de traiter des grandes fenêtres spectrales. Dans le cas d'algorithmes opérationnels la sélection des « canaux » pourra conduire à limiter la valeur de l'entropie informationnelle à un niveau où celle-ci varie peu lors d'ajout de « canaux » supplémentaires. Dans le cas de N₂O, un algorithme opérationnel peut se limiter à prendre des points dans la région 1145 – 1160 cm⁻¹. L'information apportée par la région 1170 – 1195 cm⁻¹ (que l'on ne peut pas considérer comme totalement redondante) peut cependant être négligée du fait de sa faible proportion devant la quantité totale d'information dans la fenêtre 1145 – 1195 cm⁻¹.

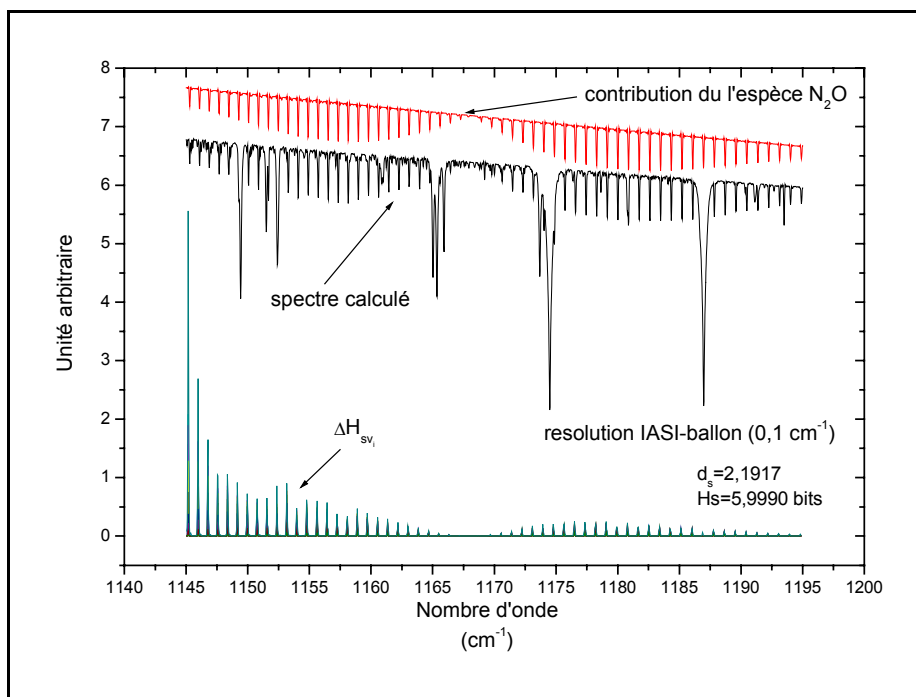


Figure IV.3 : Entropie informationnelle de N_2O dans la fenêtre $1145 - 1195 \text{ cm}^{-1}$. En noir le spectre calculé et en rouge la contribution spectrale de N_2O .

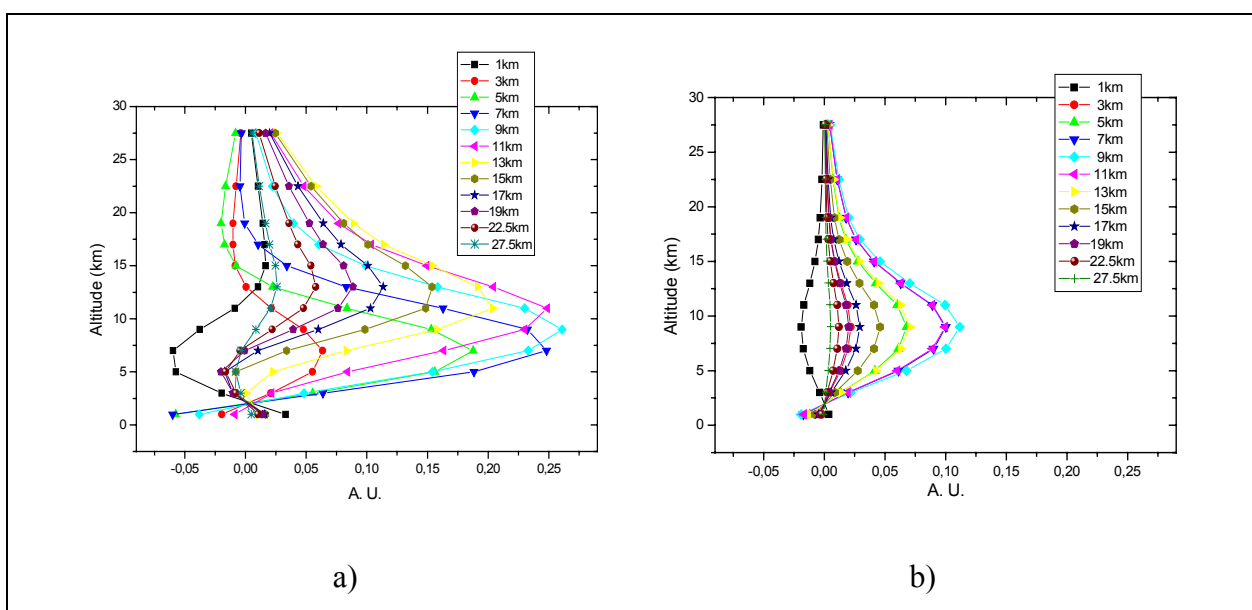


Figure IV.4 : Noyaux moyens pour N_2O obtenus dans la fenêtre $1145 - 1195 \text{ cm}^{-1}$ pour les résolutions ; (a) IASI-Ballon et (b) IASI/MetOp.

Les noyaux moyens obtenus pour N_2O montrent qu'à la résolution spectrale de IASI-ballon (Fig. IV.4 a), on a bien deux informations indépendantes qu'on peut situer autour de 5 km et de 15 km. Le fait que la résolution verticale soit limitée (environ 10 km) rend peu probable la restitution de 2 niveaux non corrélés. Nous avons estimé qu'à partir des spectres IASI02 la restitution d'un profil de N_2O était délicate, mais que la détermination de la colonne de N_2O était tout à fait accessible. Cela revient à ne considérer qu'un seul élément

d'information dans le profil de N_2O . La détermination des noyaux moyens à partir de spectres « IASI-like » (Fig. IV.4 b) à la résolution dégradée à $0,5 \text{ cm}^{-1}$ corroborant les résultats obtenus pour les spectres IASI-ballon. Il apparaît nettement qu'on ne peut obtenir qu'une seule information sur le profil avec des pics situés vers 10 km d'altitude. Pour les spectres « IASI-like » on confirme tout comme pour les spectres IASI-ballon que la restitution de la colonne est possible. Mais l'information sur les profils à travers l'algorithme d'inversion n'est pas suffisamment décorrélée dans les spectres IASI-ballon pour effectuer une restitution du profil par morceaux et devient impossible à partir des spectres à la résolution de IASI/MetOp.

Les fonctions de poids de N_2O dans la fenêtre $1145 - 1195 \text{ cm}^{-1}$ ont été tracées pour un spectre « IASI-like » (Fig. IV.5). On y observe la sensibilité du spectre au profil vertical de N_2O . On constate que les raies de N_2O dans la fenêtre sont sensibles aux différentes altitudes. Mais avec une sensibilité de N_2O plus importante au niveau de 10 km d'altitude, comme on l'avait déjà vu pour les noyaux moyens. Ces deux méthodes montrent que, pour la fenêtre $1145 - 1195 \text{ cm}^{-1}$, on ne dispose que d'une seule information. La sensibilité du spectre par rapport aux profils ainsi que la sensibilité des noyaux moyens ne permettent pas l'inversion d'un profil complet. En contrepartie la restitution de la colonne de N_2O est possible et justifie l'emploi de cette fenêtre même à la résolution dégradée (par rapport à IASI-ballon) de l'instrument IASI.

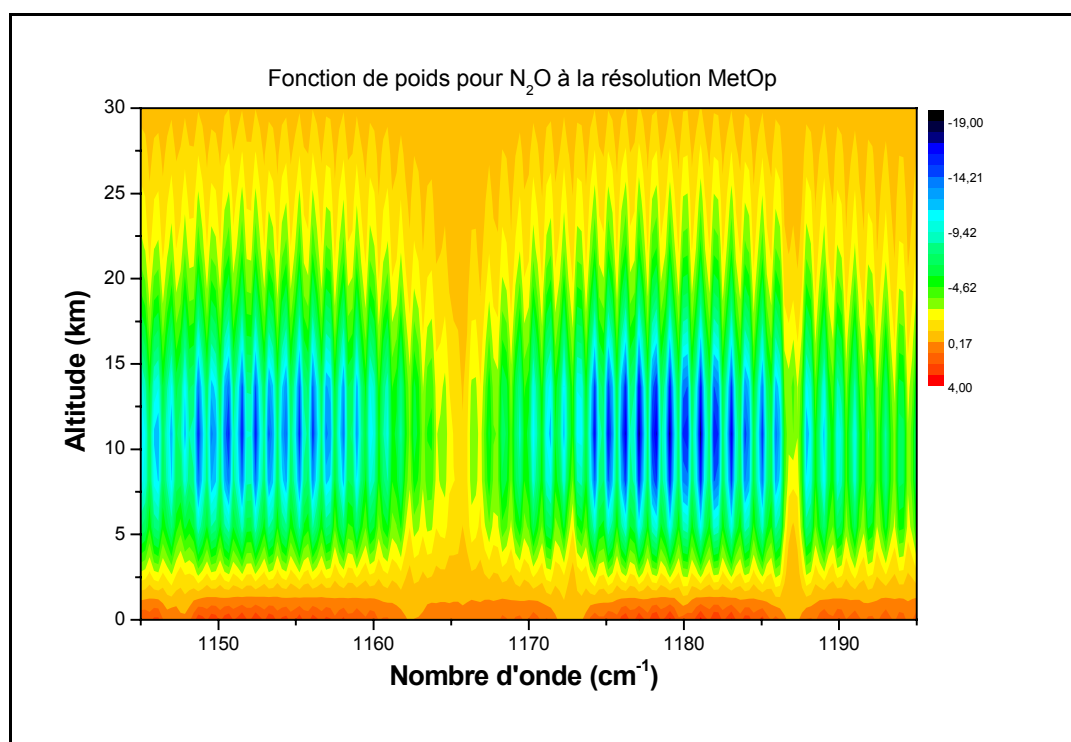


Figure IV.5 : Fonctions de poids de N_2O dans la fenêtre $1145 - 1200 \text{ cm}^{-1}$ pour un spectre à la résolution de IASI/MetOp

On remarque tout de même que vers 1187 cm^{-1} on a une absence de sensibilité dans les noyaux moyens et cela bien qu'on constate la présence de raies de N_2O dans cette région. On explique ce manque de sensibilité par la faible intensité de la raie de N_2O par rapport aux raies voisines (*Fig. IV.1*) mais surtout par la raie de vapeur d'eau qui se superpose à la raie de N_2O . Cela montre que la présence de raies superposées pour des espèces chimiques différentes vient dégrader l'accès à l'information sur une des espèces et ceci indépendamment de la résolution spectrale.

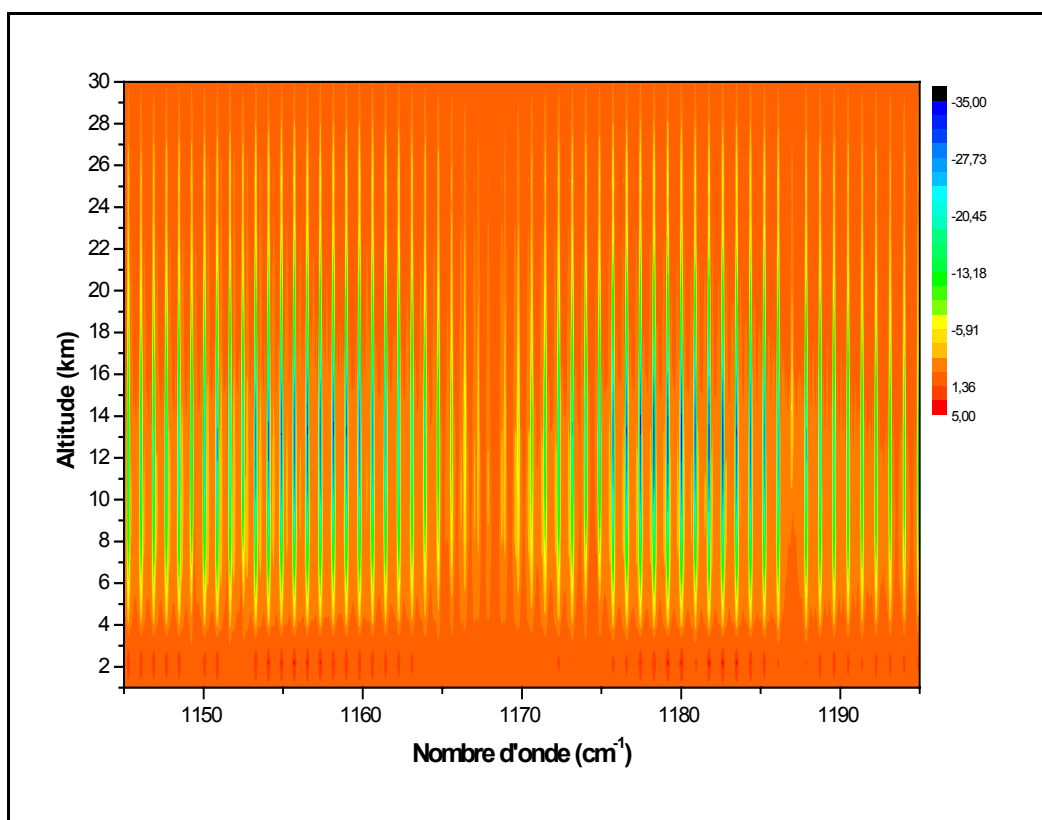


Figure IV.6 : Fonctions de poids de N_2O dans la fenêtre $1145 - 1200\text{ cm}^{-1}$ pour un spectre à la résolution de IASI-ballon

A la résolution des spectres IASI-ballon, on observe toujours ce manque d'information pour la raie vers 1187 cm^{-1} (*Fig. IV.6*). On a comme pour les spectres « IASI-like », la même sensibilité en fonction du nombre d'onde avec peut être une plus grande sensibilité dans le cas des spectres à la résolution IASI-ballon. La sensibilité pour les basses altitudes reste faible comme pour l'inversion des profils d'ozone traitée dans le chapitre III.

IV.1.3 Comparaison des résultats obtenus avec les spectres dégradés à la résolution « IASI-like »

Les spectres dégradés à la résolution de IASI/MetOp ont été inversés en ne déterminant que la colonne totale de N_2O . La figure IV.7 montre un exemple de spectre « IASI-like » ajusté. On arrive à un assez bon accord avec un résidu en température inférieur à 1 K. On constate tout de même un problème analogue aux spectres à la résolution IASI-ballon, c'est-à-dire une difficulté à bien reproduire les raies de la vapeur d'eau présente dans la micro-fenêtre.

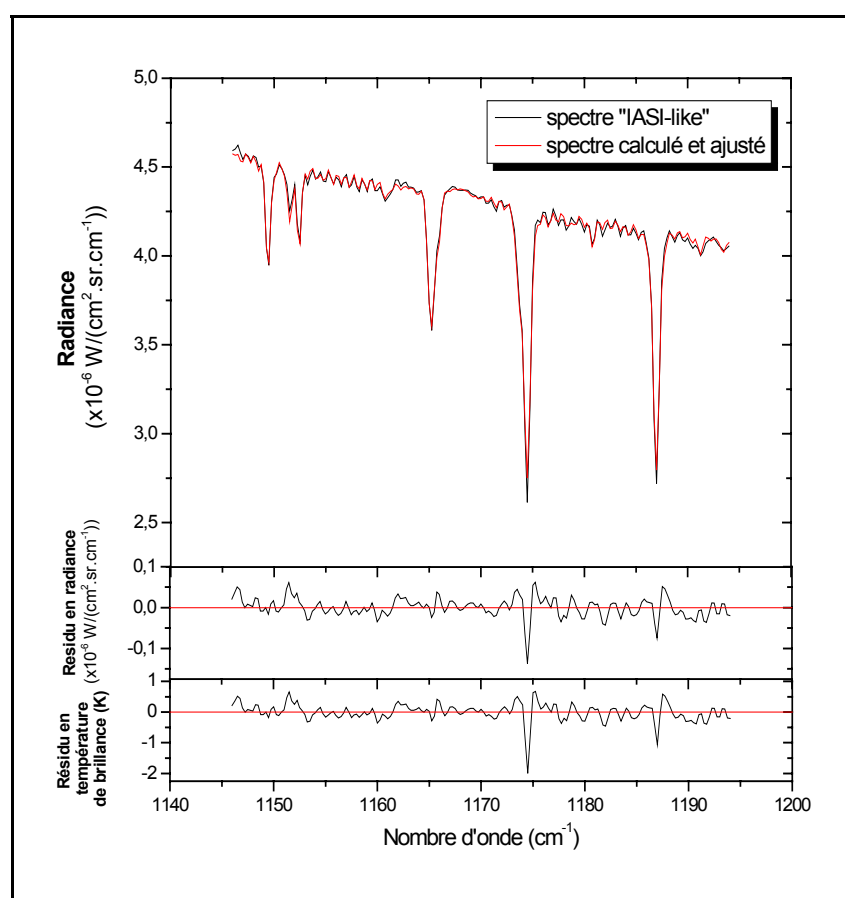


Figure IV.7: Exemple d'ajustement de spectre dégradé à la résolution IASI/MetOp dans la fenêtre 1140 - 1200 cm^{-1} .

On note la présence du CFC-12 qui reste visible dans les spectres « IASI-like » vers 1161 cm^{-1} . Lors des ajustements des spectres le coefficient multiplicateur de la colonne de CFC-12 a été ajusté, mais une forte contrainte est appliquée sur ce coefficient afin que la colonne ne prenne pas des valeurs qui fluctuent trop et l'erreur associée à cette inversion est donc assez élevée.

A partir des inversions des spectres à la résolution IASI-ballon et à la résolution IASI/MetOp, les colonnes de N_2O ont été déterminées et représentées en fonction du temps du vol IASI02 (Fig. IV.8). La comparaison des colonnes totales aux deux résolutions montre un bon accord compte tenu des barres d'erreurs avec moins de 7% de différence pour les valeurs des colonnes. Vers la fin du vol on arrive à un très bon accord entre les inversions des spectres aux deux résolutions. Les variations en fonction du temps se retrouvent dans chaque jeu de colonne avec une amplitude plus grande tout de même pour les colonnes à la résolution IASI-ballon. Les différences d'amplitude s'expliquent par le fait que les spectres IASI-ballon (à une résolution spectrale plus élevée) ont une entropie informationnelle plus grande et donc que le nombre de cas que l'on peut déterminer est plus grand qu'à partir des spectres « IASI-like ». On a un « choix » plus grand pour dans la détermination de la colonne et donc une plus grande sensibilité qui se traduit dans une plus faible variabilité de la solution. Dans le cas des spectres « IASI-like » l'information réduite résultant d'une plus faible résolution spectrale entraîne des variations plus grandes.

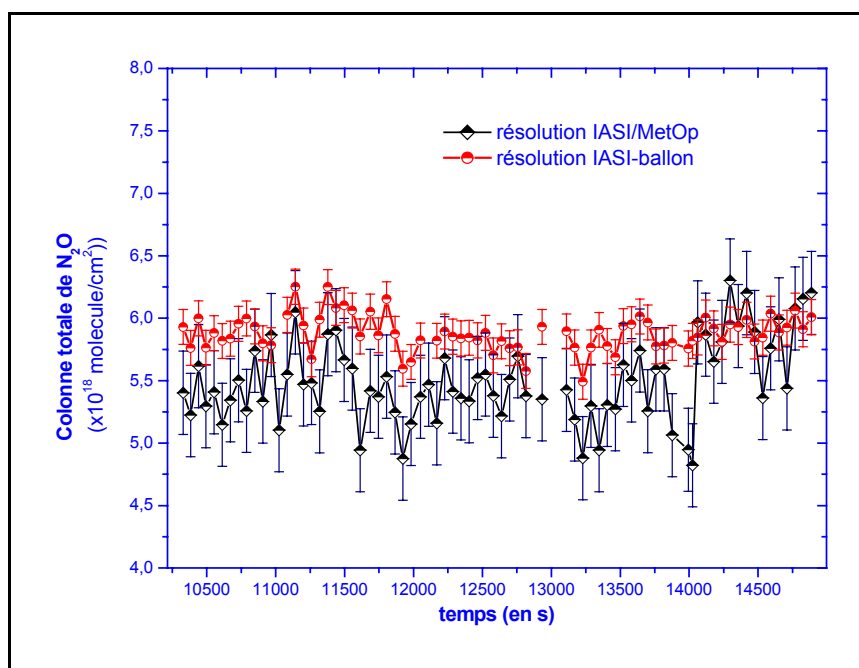


Figure IV.8: Colonnes totales de N_2O obtenus à partir du vol IASI02. La restitution des colonnes est effectuée en inversant les spectres à la résolution IASI-ballon et à la résolution IASI/MetOp dans la fenêtre 1145 - 1195 cm^{-1} .

Un décalage systématique d'environ 7 % entre les séries de résultats est observé. Il semble qu'à la résolution de IASI/MetOp on ait un biais qui se traduit par une sous-estimation de la colonne totale inversée de N_2O . Nous n'avons pas trouvé encore la cause de ce biais qui apparaît également dans l'inversion de N_2O par l'équipe de recherche du Service Aéronomie

(communication orale à l'ISSWG-18 le 26-28 novembre 2004 à Lannion). Nos simulations ont permis de montrer que ce biais n'était pas dû à une variation du bruit lors de la dégradation spectrale. En partant de spectres simulés de type IASI-ballon auxquels on ajoute du bruit (d'amplitude rms ajustable) et en les dégradant (par la même procédure que ce qui a été fait sur les spectres réels) à la résolution IASI/MetOp, on constate que l'inversion de ces derniers spectres conduit toujours à une colonne de N_2O inférieur à la colonne obtenue par inversion des spectres IASI-ballon

IV.1.4 Conclusion

L'inversion de la fenêtre $1145 - 1195 \text{ cm}^{-1}$ a montré que l'on pouvait restituer la colonne de protoxyde d'azote (N_2O) avec une précision satisfaisante. L'entropie informationnelle et les noyaux moyen ont montré que la détermination d'un profil est difficile étant donnée le manque d'information verticale pour N_2O . Ces résultats se retrouvent dans le cas de l'inversion de spectres à la résolution de IASI/MetOp. On obtient une assez bonne concordance des résultats entre les différentes inversions. On estime donc possible la détermination de la colonne de N_2O à la résolution de IASI/MetOp dans cette région spectrale. La restitution de la colonne montre tout de même un biais systématique qui sous estime la valeur de la colonne par comparaison à la valeur inversée à partir des spectres IASI-ballon. Ce biais reste mal expliqué, mais il ne peut pas être dû à la dégradation des spectres et notamment au bruit instrumental.

IV.2 Fenêtre 1240 - 1320 cm^{-1}

IV.2.1 Espèces chimiques en présence et ajustement des spectres

Une autre fenêtre pour effectuer l'inversion de la colonne de N_2O se situe dans la région spectrale entre 1240 et 1320 cm^{-1} . Dans cette région le rapport signal sur bruit est un peu plus faible du fait qu'on se situe dans une région où le signal est plus faible en radiance. Dans cette région spectrale on trouve la présence de vapeur d'eau et de méthane (CH_4). On peut noter la présence de raies de CO_2 et de HNO_3 dans cette région mais qui sont peu visibles dans les spectres IASI02.

Dans cette région spectrale nous n'avons considéré pour les simulations de spectres que la présence des espèces CH_4 , N_2O et H_2O (Fig. IV.9). Les signatures spectrales observables pour ces trois espèces laissent à penser qu'on pourrait restituer une colonne pour chacune de ces molécules.

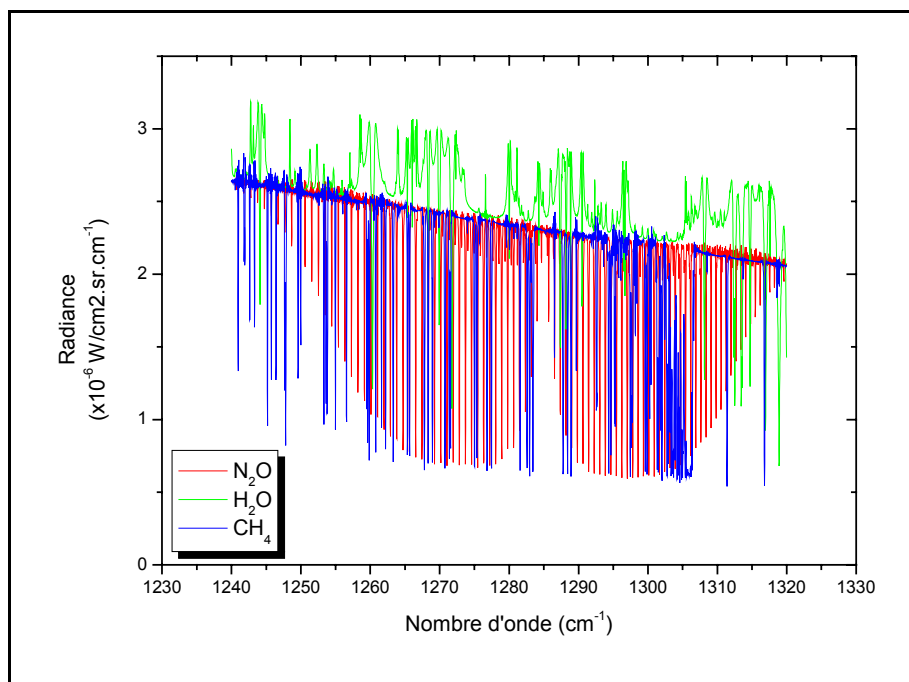


Figure IV.9 : Espèces prises en compte dans les simulations de la région 1240 – 1320 cm^{-1}

L'ajustement des spectres IASI02 en ne considérant que H_2O , N_2O et CH_4 semble conduire à un bon accord entre calcul et mesure. Les résidus bien que plus importants que dans les régions précédemment inversées (à 950 - 1150 cm^{-1} et 1145 - 1195 cm^{-1}) ne sont pas corrélés avec les raies (Fig. IV.10). En fait, le résidu obtenu est de l'ordre de l'ordre du bruit de la mesure. On peut noter que la non de prise en compte des espèces HNO_3 et de CO_2 ne semble pas poser de problème. Ne pas retenir HNO_3 et CO_2 dans les simulations est donc justifié par un résidu qui ne fait pas apparaître des raies supplémentaires ne pouvant être attribuées à N_2O , H_2O ou CH_4 et par l'absence de corrélations entre HNO_3 , CO_2 avec H_2O , N_2O ou CH_4 . En fait ces raies sont présentes dans les spectres mais leur contribution est du même ordre de grandeur que le bruit. L'introduction dans les simulations d'espèces dont la signature spectrale est faible n'améliore pas notablement le résidu et augmente notablement le temps de traitements de chaque spectre.

Les ajustements des spectres restent satisfaisants même si l'on observe tout de même une moins bonne simulation des raies de la vapeur d'eau comme dans les simulations dans la

micro-fenêtre précédente (1045 - 1195 cm^{-1}). On estime que l'erreur commise dans la reproduction des contributions exactes des raies de la vapeur d'eau peut provenir d'une mauvaise simulation du continuum de la vapeur d'eau mais aussi de problèmes liés à la spectroscopie comme les largeurs des raies et leurs intensités ou au profil de température. Les molécules N_2O et CH_4 peuvent être considérées comme des espèces chimiques dont on peut estimer avec une certitude satisfaisante la colonne totale dans cette micro-fenêtre. La prise en compte de la vapeur d'eau est indispensable dans les simulations, mais les résultats dans cette région spectrale ne peuvent pas être considérés comme fiables du fait d'un résidu important pour cette molécule, résidu que l'on a peine à réduire.

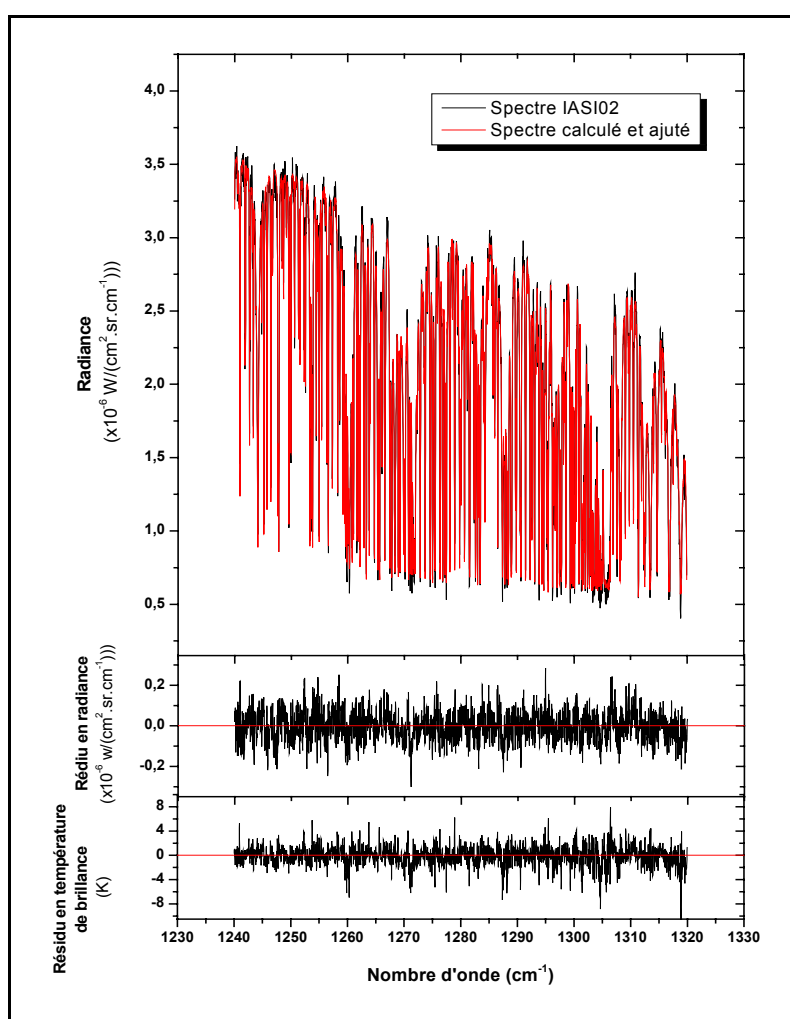


Figure IV.10 : Exemple d'ajustement d'un spectre IASI02 dans la région 1240 – 1320 cm^{-1} , avec en dessous le résidu en radiance et en température de brillance.

IV.2.2 Colonne totale de CH₄ et de N₂O

Les colonnes totales de N₂O et CH₄ pour la partie correspondant à la fin du vol ballon IASI02 sont représentées dans les figures IV.11 a) et b). Au cours du vol on a une relative stabilité dans les quantités de molécules détectées. Ainsi pour la colonne de N₂O, on trouve une variation maximale de moins de $0,35 \cdot 10^{18}$ molécules/cm² (soit environ 5 % de la valeur moyenne) et pour la colonne de CH₄ une variation de moins de $0,25 \cdot 10^{19}$ molécules/cm² (soit environ 6 % de la valeur moyenne). En comparant les colonnes de CH₄ et N₂O en fonction du temps, on peut remarquer que les variations des colonnes sont corrélées. Ainsi quand la colonne de méthane diminue celle de N₂O diminue aussi.

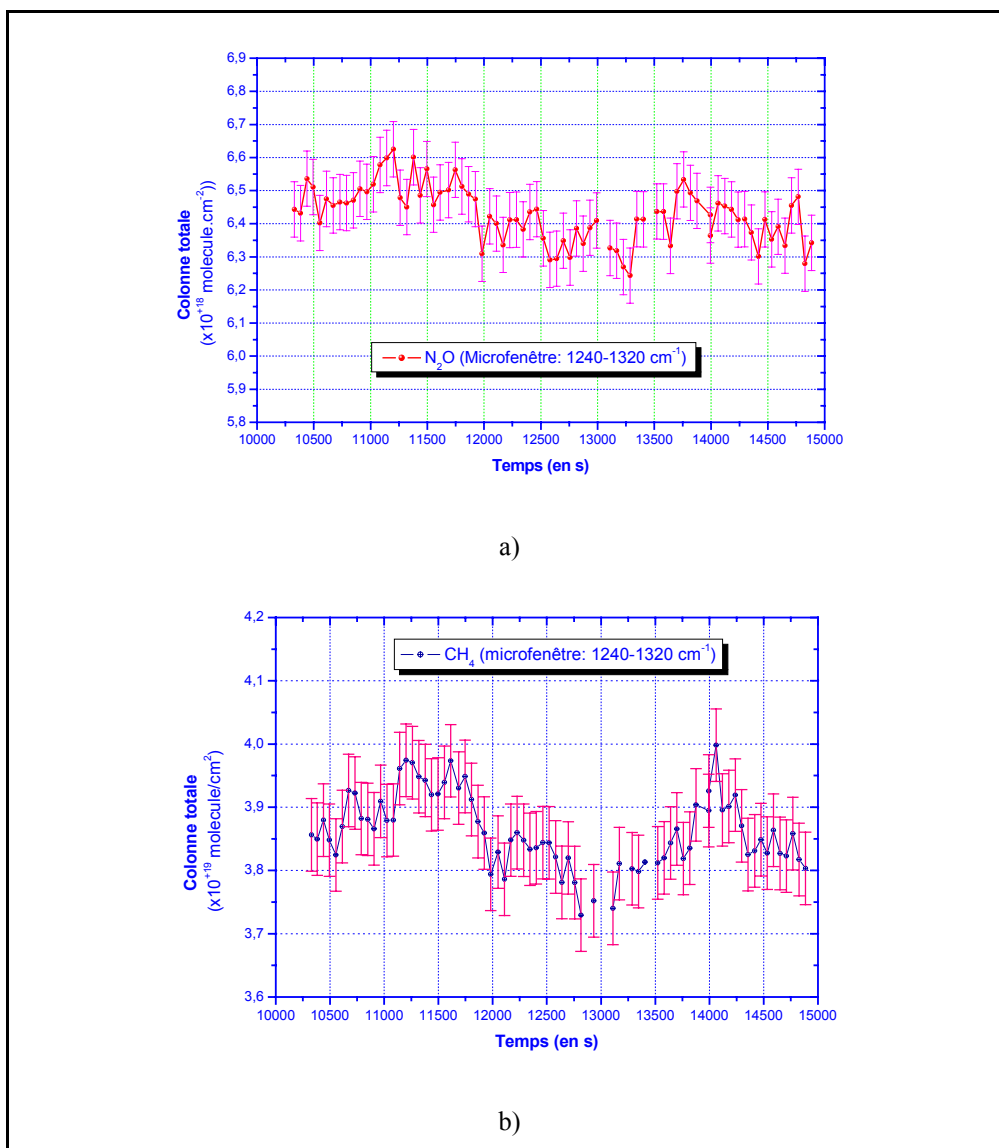


Figure IV.11 : Colonne totale obtenues à partir des spectres IASI02 pour l'inversion de la région 1240 – 1320 cm⁻¹ de (a) N₂O et (b) CH₄.

En traçant les colonnes de CH_4 en fonction des colonnes de N_2O (Fig. IV.12) on met en évidence la corrélation qui existe entre ces deux espèces chimiques. La comparaison entre les colonnes de N_2O obtenues en inversant les spectres IASI02 dans la région de $1145 - 1195 \text{ cm}^{-1}$ et les spectres de la région $1240 - 1320 \text{ cm}^{-1}$ montre une différence notable de 8 % entre les valeurs moyennes des colonnes totales. En traçant les valeurs des colonnes de CH_4 en fonction des valeurs des colonnes de N_2O de la région $1145 - 1195 \text{ cm}^{-1}$, la corrélation est beaucoup moins marquée. La bonne corrélation entre N_2O et CH_4 provient du fait que ces 2 espèces sont à longue durée de vie dans la troposphère. Les valeurs plus faibles de colonnes de N_2O ainsi qu'une amplitude plus grande des valeurs obtenues pour la région $1240 - 1320 \text{ cm}^{-1}$ peuvent s'expliquer par le fait d'un rapport signal sur bruit plus important dans cette micro-fenêtre entraînant une détermination de la valeur de la colonne plus difficile à travers l'inversion des spectres.

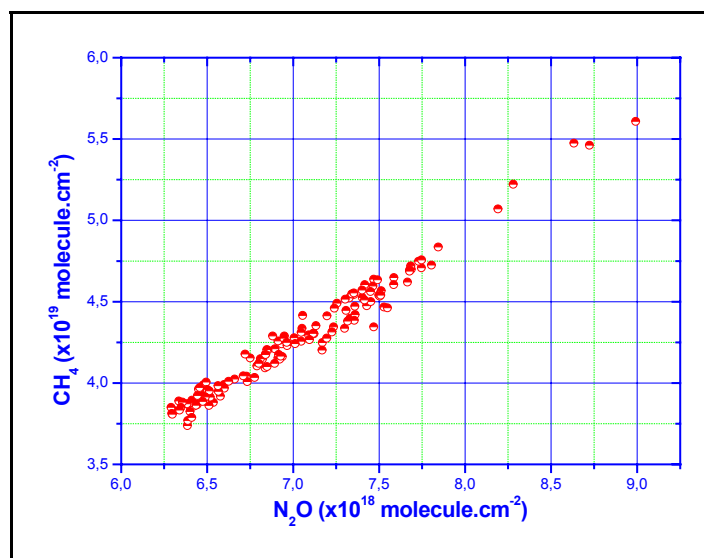


Figure IV.12: Corrélation entre les colonnes totales $\text{CH}_4/\text{N}_2\text{O}$ à partir de l'inversion de la micro-fenêtre $1240-1320 \text{ cm}^{-1}$.

Tout comme l'ozone, le méthane et le protoxyde d'azote sont des produits opérationnels de l'instrument SCIAMACHY. Les valeurs moyennes des colonnes de CH_4 et de N_2O présentées précédemment ont été utilisées pour la validation de SCIAMACHY pour le jour du vol de IASI02 le 5 août 2002. La comparaison des résultats montre que l'instrument SCIAMACHY fournit des valeurs inférieures à celles de IASI02. La valeur moyenne utilisée pour N_2O est celle trouvée à partir de l'inversion de la micro-fenêtre $1240 - 1320 \text{ cm}^{-1}$ que nous estimons plus proche de la valeur « réelle » du fait que la prise en compte des inversions multifenêtres (dont nous parlons par la suite et qui considère les deux fenêtres simultanément)

conduit à des résultats pour les colonnes qui se rapprochent plus des résultats de la fenêtre 1240 – 1320 cm^{-1} seule.

Pour CH_4 (Fig. IV.13 a) et b)) on trouve un biais négatif de SCIAMACHY de 25 % environ pour le méthane inversé dans la bande 7 (Fig. IV.13 a). Ces résultats sont en accord avec les résultats obtenus à partir des mesures du sol présentées au dernier *Workshop* de validation de ENVISAT, pour lesquels l'accord mesures corrélatives/SCIAMACHY est compris entre – 40 et + 40 % suivant les instruments au sol.

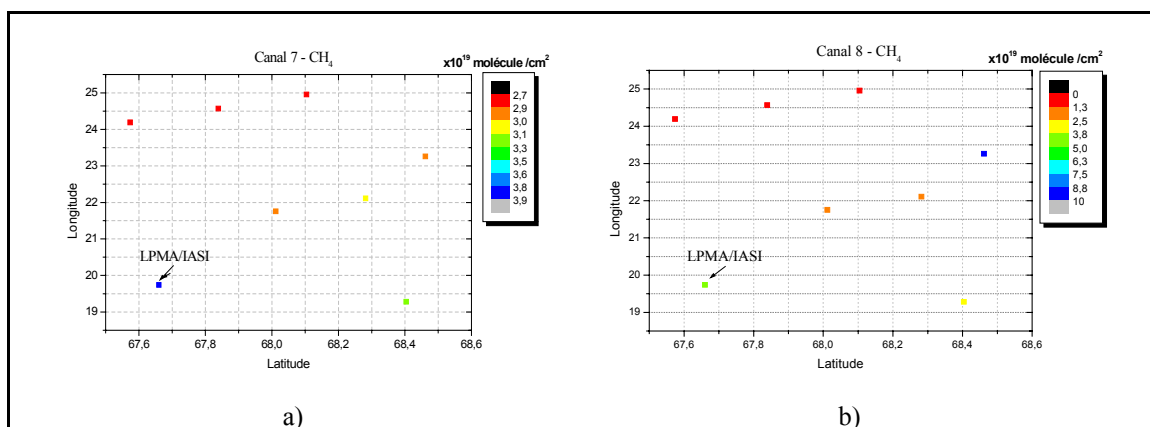


Figure IV.13 : Colonnes de méthane mesurées par LPMA/IASI et par SCIAMACHY dans la bande 7 (a) et la bande 8 (b) en fonction de la position de la mesure. [DUF04]

Un désaccord plus important est observé dans le cas des colonnes de N_2O de SCIAMACHY qui sont sous-estimées d'environ 60 % (Fig. IV.14). Des écarts similaires ont été observés avec les instruments au sol. La valeur plus faible trouvée pour la colonne moyenne de N_2O à partir de la micro-fenêtre 1145 – 1195 cm^{-1} réduit ce biais (53 %) mais il reste tout de même important, ce qui confirme que SCIAMACHY sous-estime largement la colonne de N_2O .

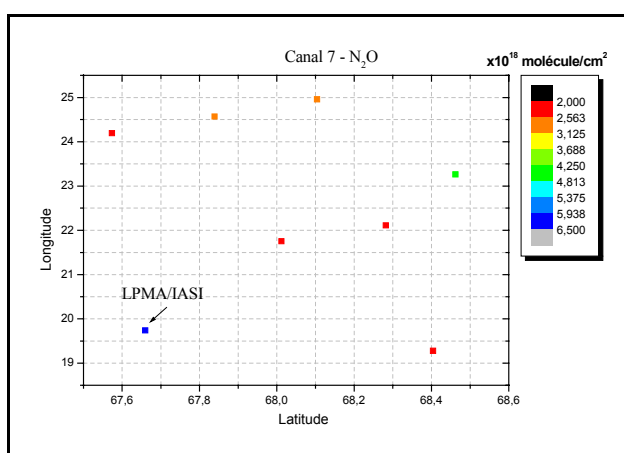


Figure IV.14 : Colonnes de N_2O mesurées par LPMA/IASI et par SCIAMACHY dans la bande 7 en fonction de la position de la mesure. [DUF04]

Il est à noter que les mesures de SCIAMACHY dans les bandes 7 et 8 sont de moindre qualité en raison d'un dépôt de glace sur les détecteurs de l'instrument d'ENVISAT. Ceci peut expliquer les grandes différences observées dans les résultats. Plusieurs essais de décontamination de l'instrument sur la plate-forme ENVISAT ont permis de diminuer cette couche de glace.

IV.2.3 Comparaison des résultats avec les spectres dégradés « IASI-like »

Les spectres de la région $1240 - 1320 \text{ cm}^{-1}$ ont été dégradés spectralement pour générer des spectres à la résolution IASI/MetOp et comparer l'impact sur les colonnes totales de N_2O et CH_4 .

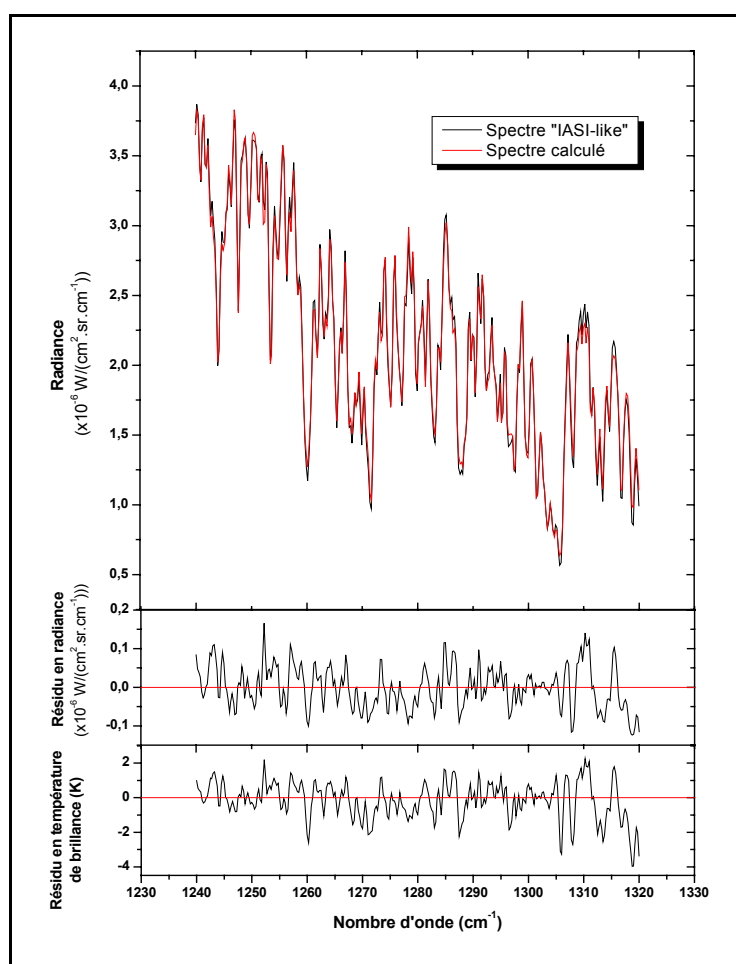


Figure IV.15 : Exemple d'ajustement d'un spectre « IASI-like » dans la région $1240 - 1320 \text{ cm}^{-1}$, avec en dessous le résidu en radiance et en température de brillance.

La figure IV.15 montre un exemple de l'ajustement d'un spectre IASI-like. On retrouve un bon accord entre les spectres « IASI-like » et les spectres calculés avec en général des

résidus en température de l'ordre de 1 K. Les plus grands écarts (plus de 3 K) sont dus, tout comme pour les spectres IASI-ballon, à des problèmes d'ajustement des raies de vapeur d'eau dans cette micro-fenêtre.

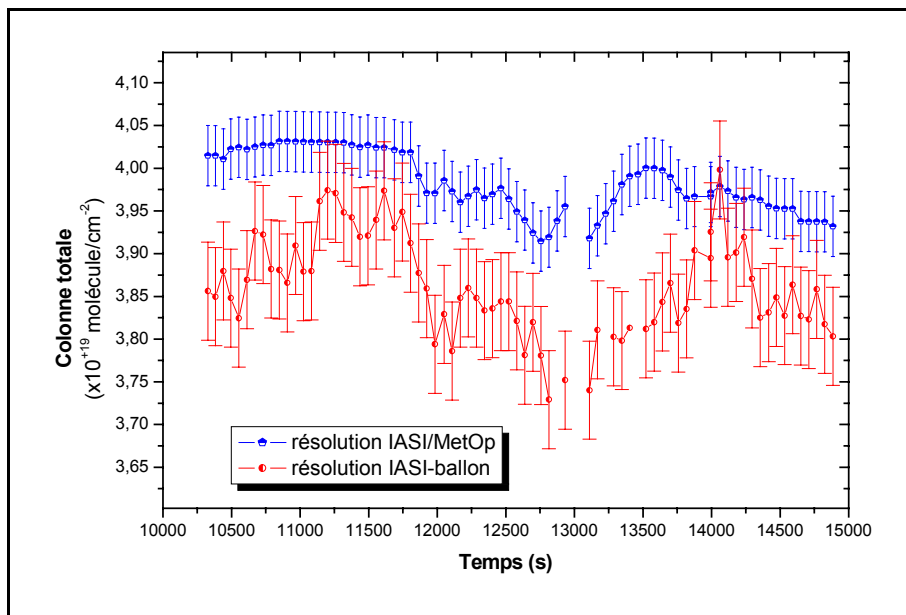


Figure IV.16: Comparaison entre les colonnes totales de méthane obtenues par inversion des spectres à la résolution IASI-ballon et à la résolution IASI/MetOp.

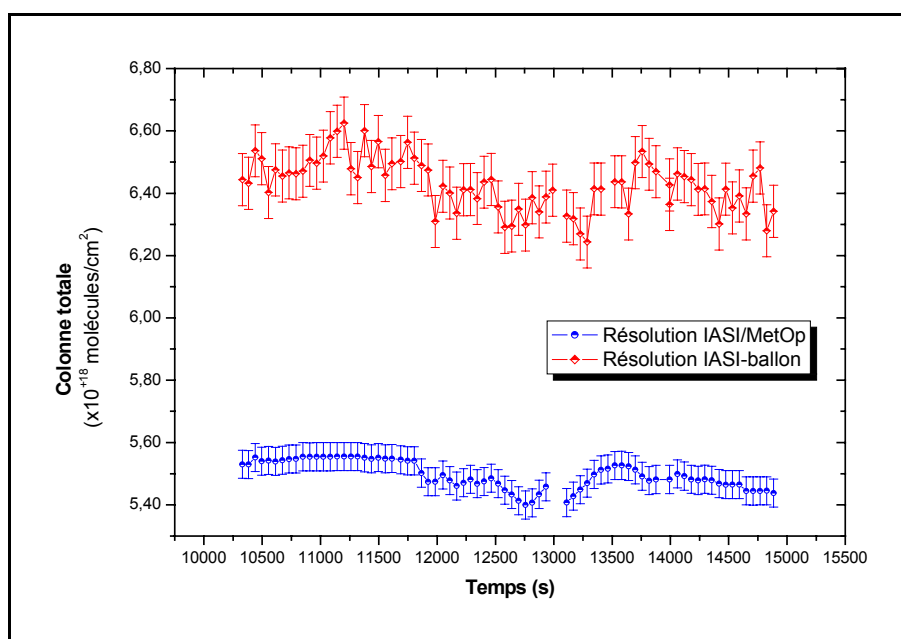


Figure IV.17: Comparaison entre les colonnes totales de N₂O obtenues par inversion des spectres à la résolution IASI-ballon et à la résolution IASI/MetOp.

Les colonnes totales obtenues à partir des spectres IASI-like pour le méthane montrent un bon accord avec celles obtenues à partir des spectres IASI-ballon. Les colonnes de N₂O révèlent un biais de 15 % qui est beaucoup plus important que celui trouvé pour la région 1145 - 1195 cm⁻¹ (environ 7 %). On retrouve le phénomène de sous-estimation de la colonne totale

pour le sondage de N_2O dans les spectres à la résolution spectrale de IASI/MetOp. On l'explique par le nombre important de raies de CH_4 mélangées à celle de N_2O , ce qui introduit une source d'erreur dans l'estimation de l'espèce présentant les raies les plus faibles (N_2O). La forte corrélation entre les 2 espèces chimiques N_2O et CH_4 se retrouve dans l'allure des colonnes totales inversées (*Fig. IV.16 et IV.17*).

Au vu de ces résultats, il convient de privilégier la micro-fenêtre 1145 - 1195 cm^{-1} pour l'inversion de N_2O dans le cas de spectres à la résolution de IASI-ballon. Les colonnes obtenues à partir des spectres IASI/MetOp pour la fenêtre 1240 – 1320 cm^{-1} nous semblent satisfaisantes et cette fenêtre reste exploitable à la fois pour CH_4 et pour N_2O .

IV.3 Fenêtre 2149 - 2170 cm^{-1}

IV.3.1 Espèces chimiques en présence et ajustement des spectres

Le monoxyde de carbone (CO) est un gaz à effet de serre, mais CO est surtout étudié du fait de sa réactivité avec OH, diminuant ainsi le pouvoir oxydant de l'atmosphère. La colonne de CO a déjà été inversée à partir des spectres de l'instrument IMG que ce soit par une mode de réseau de neurones [CLE99] ou par la méthode d'estimation optimale [ROM02]. L'étude de la molécule de monoxyde de carbone (CO) et l'inversion de sa colonne sont possibles à partir des spectres infrarouges dont nous disposons. Le choix de la fenêtre s'avère assez contraint du fait du peu de régions spectrales où les raies de CO sont suffisamment intenses pour permettre une inversion. La fenêtre dans la région 2149 – 2170 cm^{-1} a l'avantage d'être une région où l'on peut inverser la colonne de CO. Cette fenêtre permet d'avoir des raies assez bien isolées les unes des autres. Un des problèmes vient du fait que pour les spectres du vol IASI02, le bruit dans cette région du spectre est plus grand que celui attendu. Pour l'enregistrement de ces spectres l'ouverture du détecteur a été diminuée ce qui a réduit le nombre de photons arrivant sur le détecteur InSb, conduisant ainsi à un rapport signal sur bruit plus faible que pour le vol IASI01. Une autre difficulté vient de la présence de nombreuses raies attribuables à des espèces chimiques différentes. Mais hormis la contribution de N_2O , de O_3 et de la vapeur d'eau on estime que les autres espèces chimiques ont un impact négligeable dans cette fenêtre (*Fig. IV.18*).

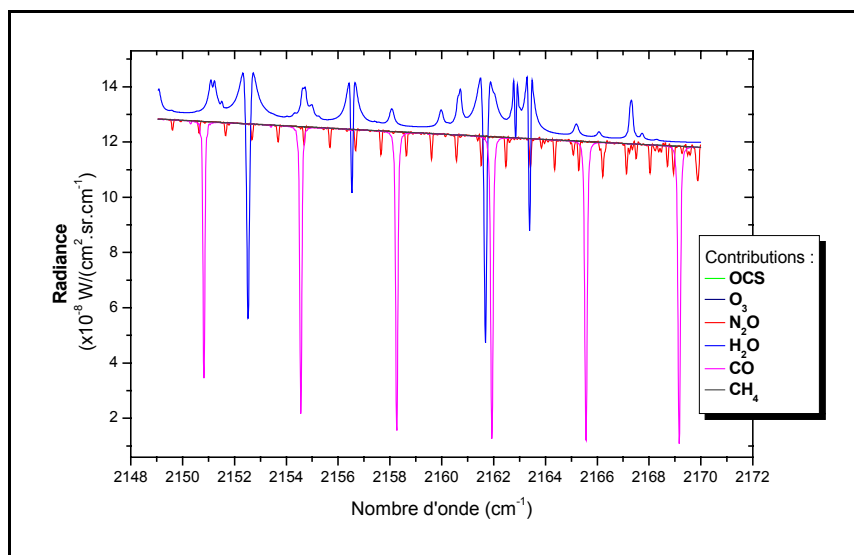


Figure IV.18 : Contribution spectrale des différentes espèces chimiques dans la fenêtre 2149 – 2170 cm^{-1} .

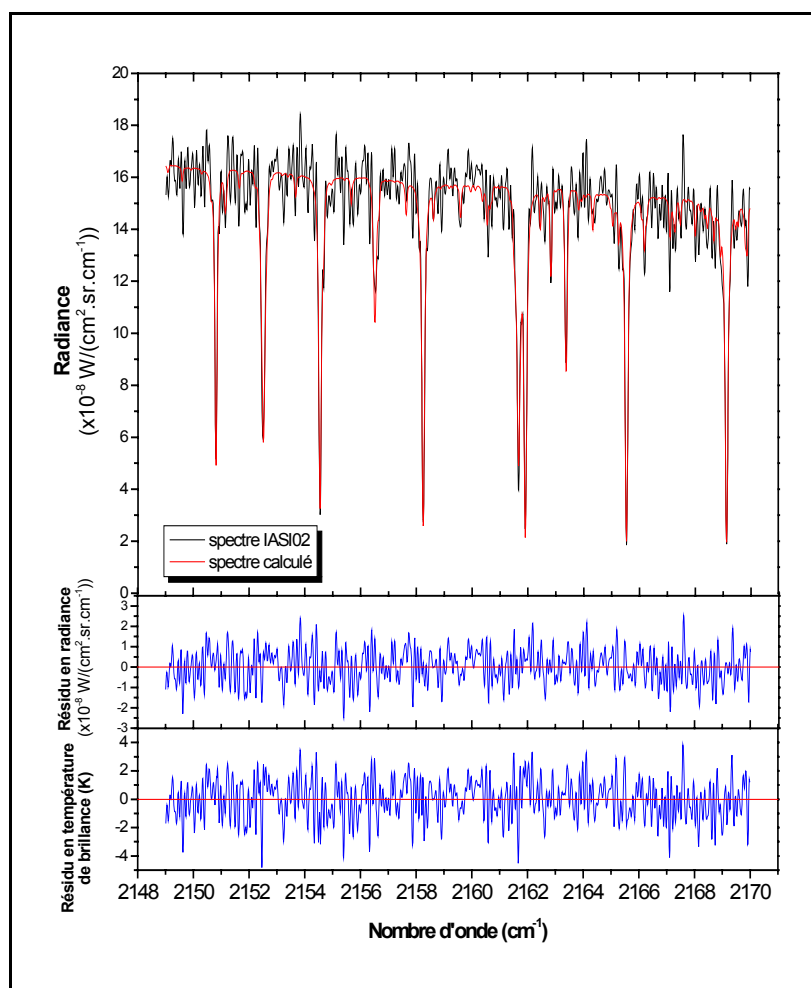


Figure IV.19 : Exemple d'ajustement de spectre IASI02 dans la région 2149 - 2170 cm^{-1} .

Comme nous l'avons vu dans les autres fenêtres étudiées précédemment, la vapeur d'eau reste toujours difficile à ajuster correctement. Pour l'espèce N₂O on contraint le profil à

la valeur moyenne trouvée dans la fenêtre 1240-1320 cm^{-1} . La faible contribution de N_2O et le bruit important dans la fenêtre rendent inutile une inversion du protoxyde d'azote à partir de la micro-fenêtre considérée ici pour CO.

L'ajustement des spectres dans ces fenêtres reste satisfaisant (*Fig. IV.19*) avec un résidu en température qui fait apparaître un fort bruit (en moyenne 5 % du signal) et problèmes d'ajustement dans le cas des raies de la vapeur d'eau vers 2152,5 cm^{-1} , 2161,7 cm^{-1} et 2167,5 cm^{-1} . Pour les raies de CO on obtient généralement un bon ajustement des profils de raies rendant possible l'inversion des colonnes à partir de cette région.

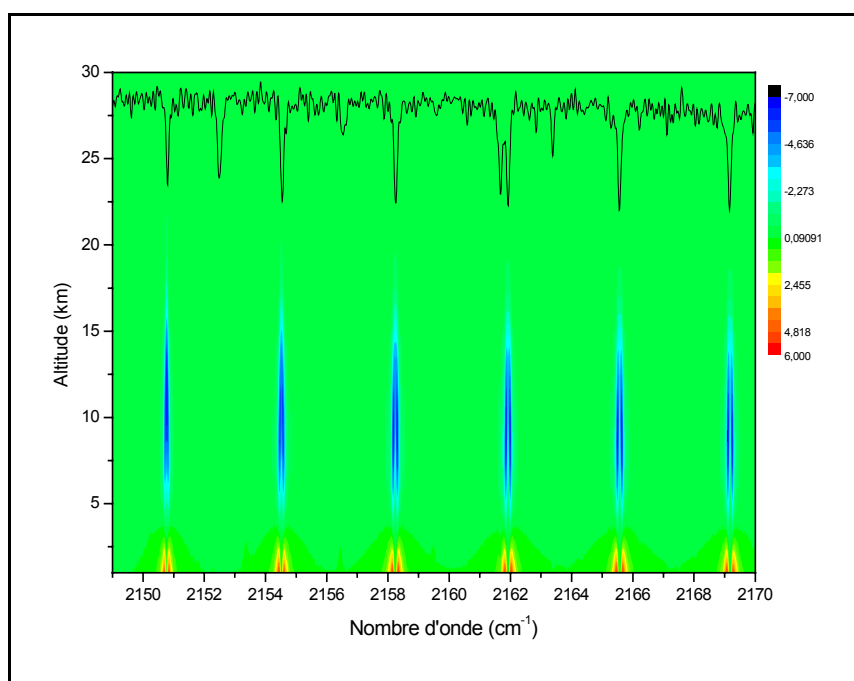


Figure IV.20: Fonction de poids pour CO dans la région spectrale 2149 – 2170 cm^{-1} (En noir le spectre IASI02 observé).

Les fonctions de poids de CO pour la micro-fenêtre 2149 – 2170 cm^{-1} montrent bien la sensibilité pour les raies de CO présentes dans l'intervalle (*Fig. IV.20*). On constate tout de même que cette sensibilité n'apparaît que pour les altitudes basses du profil (inférieures à 20 km) ce qui correspond bien avec le profil type de CO qui possède son rapport de mélange maximum pour les basses altitudes, rapport de mélange qui devient faible pour les altitudes au-dessus de 20 km. On a donc de très faibles quantités de molécules pour les altitudes au-delà de 20 km, ce qui ne permet pas de percevoir dans le spectre les contributions de ces altitudes comme le montrent les fonctions de poids. On observe une faible sensibilité pour les basses altitudes. Mais la présence de CO dans les couches basses de la troposphère se manifeste dans

le spectre au niveau des ailes de raies avec un meilleur rapport signal sur bruit. Une telle information pourrait être utile pour restituer CO dans la couche limite.

Les noyaux moyens de CO (Fig. IV.21) montrent qu'on retrouve bien un maximum d'information entre 5 et 15 km et très peu au-delà des 20 km. On visualise bien le fait qu'on ne peut avoir accès qu'à un seul niveau d'information pour CO. La trace de la matrice des noyaux moyens qui correspond au nombre de degrés de libertés d_s est égale à 1,206. Nous n'avons donc pas assez d'information à partir de cette fenêtre pour envisager l'inversion d'un profil de CO, mais la restitution de la colonne nous est permise du fait qu'on a une sensibilité de CO sur toutes les raies de la fenêtre et cela au niveau de toutes les altitudes où la quantité de CO est significative.

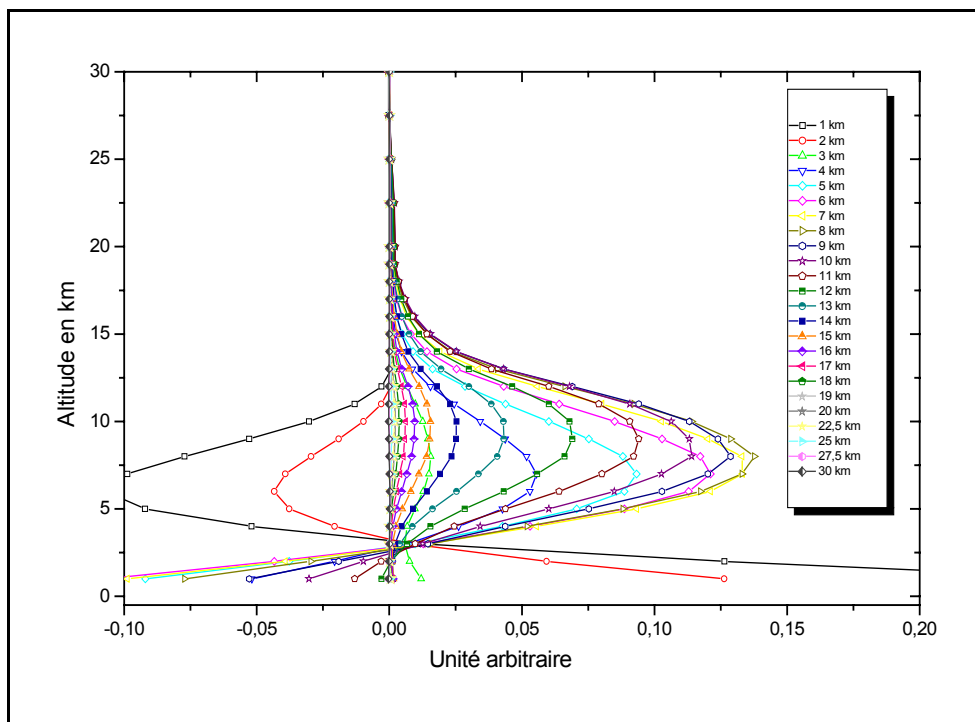


Figure IV.21: Noyaux moyens pour CO dans la région spectrale 2149–2170 cm^{-1}

Lors de l'inversion de cette fenêtre à partir des spectres du vol IASI01 la restitution du profil de CO a été possible. Le rapport signal sur bruit et la valeur absolue de la colonne totale de CO jouent beaucoup cependant dans conclusion. Les mesures IASI02 ont été réalisées dans un site peu pollué et l'instrument IASI-ballon pourrait avoir un meilleur signal/bruit dans cette région spectrale en utilisant un iris de plus grand diamètre.

IV.3.2 Comparaison des résultats avec les spectres dégradés « IASI-like »

La dégradation des spectres à la résolution de IASI/MetOp montre une diminution significative du bruit dans les spectres (*Fig. IV.22*) mais celui-ci reste tout de même plus élevé que le bruit estimé pour l'instrument IASI dans cette région spectrale pour les spectres de niveau 1c comme le montre la figure III.32 (voir chapitre précédent).

Le fait qu'on ait un bruit plus important que l'estimation pour IASI provient de ce que les spectres IASI-ballon sont assez bruités. L'ajustement pour les raies de CO est tout de même satisfaisant comme on peut le voir notamment avec un résidu en température de brillance inférieur à 1K. Les résidus supérieurs à 1K sont attribués au problème d'ajustement de la vapeur d'eau combiné au bruit important.

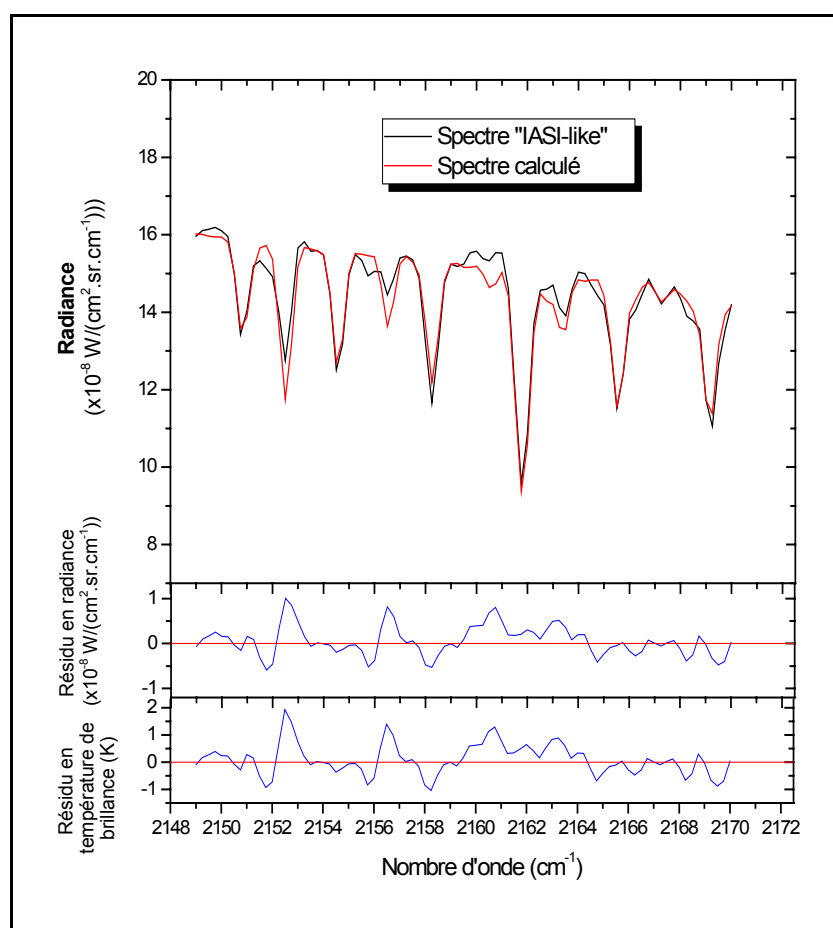


Figure IV.22 : Exemple d'ajustement de spectre « IASI-like » dans la région 2149-2170 cm⁻¹.

La comparaison des colonnes totales de CO inversées à partir des spectres aux résolutions IASI-ballon et IASI/MetOp (*Fig. IV.23*) montre un bon accord dans les variations de la colonne en fonction du temps de vol. L'écart moyen qui existe entre les valeurs trouvées

pour la résolution IASI-ballon et les valeurs des spectres IASI-like est de 8 % ce qui reste acceptable. On pourrait réduire cette différence en abaissant le bruit lors des enregistrements des spectres, c'est-à-dire en réduisant le bruit dans les deux types de spectres. Comme pour les colonnes de N₂O, on observe un biais systématique pour les valeurs des colonnes, on observe moins de CO à la résolution de IASI/MetOp.

On estime donc que le bruit important lors de l'enregistrement est la cause principale de la différence entre les valeurs trouvées pour les colonnes et que l'écart entre les estimations des colonnes aux deux résolutions peut être réduit avec des spectres moins bruités. Les valeurs et les variations de la colonne de CO montrent que la micro-fenêtre 2149 – 2170 cm⁻¹ permet l'inversion de la colonne de CO pour des spectres à la résolution de IASI/MetOp.

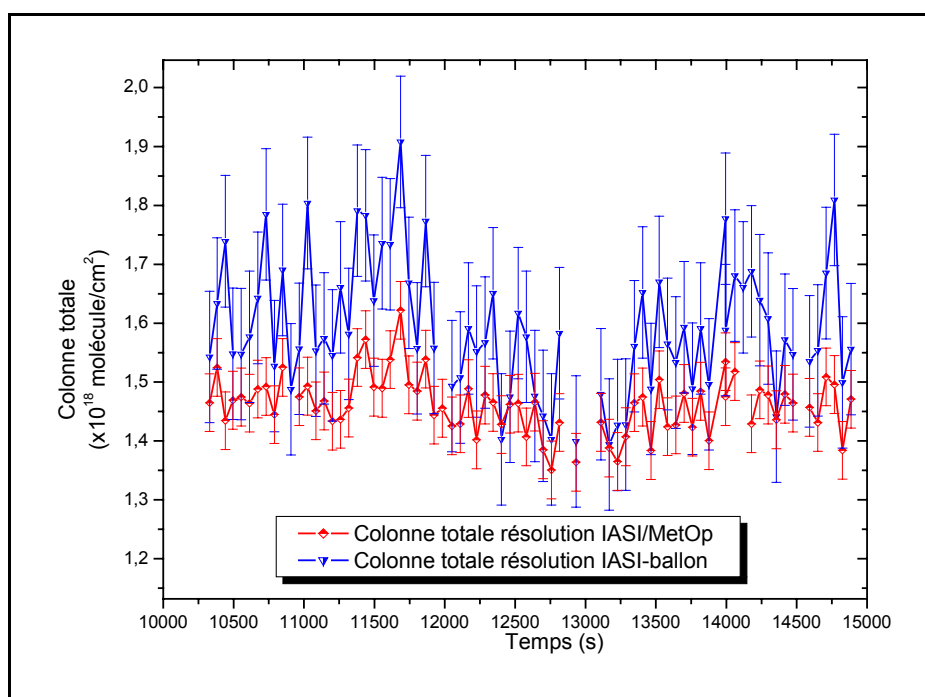


Figure IV.23 : Comparaison entre les colonnes totales de CO, obtenues à partir des spectres IASI02 et des spectres « IASI-like » dans la région spectrale 2149 - 2170 cm⁻¹.

IV.3.3 Conclusion

En raison de problèmes avec le second détecteur (InSb) durant le vol IASI02, les spectres enregistrés dans la région 2000 – 3000 cm⁻¹ sont plus bruités qu'il ne l'était pour le vol IASI01. Mais l'inversion de la colonne de CO dans la région 2149 – 2170 cm⁻¹ à tout de même été possible et les spectres calculés sont en assez bon accord avec ceux observés. Les noyaux moyens et les fonctions de poids montrent que l'information contenue

dans la fenêtre et dans les conditions expérimentales et géophysiques du vol IASI02 ne permet pas la détermination d'un profil mais que les colonnes sont mesurables.

L'ajustement des spectres à la résolution de IASI/MetOp, bien que le bruit soit plus important que celui attendu pour l'instrument IASI, permet la restitution de colonnes en assez bon accord avec les colonnes inversées avec les spectres de IASI02.

On trouve tout de même un biais dans les résultats des colonnes totales de 8 % ce qui pourrait être amélioré par le traitement de spectres moins bruités à la fois à la résolution de IASI-ballon et dans les spectres « IASI-like ». La fenêtre 2149 – 2170 cm^{-1} est donc une fenêtre intéressante pour l'inversion des colonnes de CO que notre programme d'inversion peut traiter à partir des spectres de l'instrument IASI.

IV.4 Exercice d'intercomparaison raie par raie (LIE)

IV.4.1 Le LIE et ses objectifs

L'exercice d'intercomparaison de calcul raie par raie (LIE) est un ensemble de tests et de simulations organisés et conçus pour les groupes de recherche qui sont impliqués dans la préparation de l'instrument et dans le traitement des données IASI. Le premier LIE organisé par S. Tjemkes [TJE03] c'est déroulé courant 2001, impliquant 13 d'équipes scientifiques (Tab.IV.1). Son objectif a été de comparer les simulations et les modèles de calcul de transfert radiatif raie par raie entre eux avec des spectres observés à haute résolution.

Participants	Groupe scientifique	Modèle	Caractéristiques	Référence
R. Rizzi	ADGB	HARTCODE	G97, CKD 2.4	[RIZ92]
M.W. Shepard	AER	LBLRTM V5.4	H96+T, CKD 2.4	[CLO92]
M. Matricardi	ECMWF	GENLN2 V4	H96, CKD 2.1	[EDW92]
S. Tjemkes	EUMETSAT	LBLRTM V5.4	H96, CKD 2.4	[CLO92]
J.D. Haigh	IMCOL	RFM V4.03_OXF	H96, CKD 2.1	a
M. Höpfner	KOPRA	KOPRA	H96, CKD 2.2	[CLA00]
S. Payan	LPMA	LARA	H96, CKD 2.4	-
A. Trotsenko	LITMS	LITMS	H96, CDK 2.2	[TRO89]
N. Scott	LMD	4A00	G97, CDK 2.1	[SCO81]
P. Rayer	METOF	GENLN2 V4	H96, CKD 2.1	[EDW92]
C. Clerbaux	SA	LBLRTM V5.4	H96+T, CKD 2.4	[CLO92]
S. SeSouza-Machado	UMBC	KCarata V1.04	H96, CKD 2.3	b
D. Tobin	UW	LBLRTM V5.4	H96+T, CKD 2.4	[CLO92]

Tableau IV.1 : Participants du LIE-1 et les noms des algorithmes employés pour l'exercice. Détails des bases de données : Geisa 97 (G97) [JAC99], HITRAN 96 (H96) [ROT98], HITRAN96 + mise à jour de Toth (H96+T) [TOT98], [TOT00].

(a) <http://www.atm.ox.ac.uk/RFM>,

(b) <http://asl.umbc.edu/pub/kcarta/kcarta.html>.

Dans le LIE-1, l'exercice a porté sur deux types de spectres provenant des expériences ARIES et HIS. Dans le LIE-2 que le LPMA met en place, nous proposons d'effectuer l'exercice sur 3 spectres (*Tab. IV.2*) : deux spectres sont issus d'observations faites à partir d'avion et un spectre a été enregistré lors d'un vol IASI-ballon, tous trois ayant une géométrie de visée au nadir et avec des scènes non nuageuses.

Instrument		Domaine spectral (cm ⁻¹)	Résolution (cm ⁻¹)	NeΔT (K)	Référence
ARIES	Bande I	600-1750	0,48	≤ 0,2 K vers 1000 cm ⁻¹ pour un corps noir a 280 K	[WIL99]
	Bande II	1750-3000	0,48	≤ 0,2 K vers 2700 cm ⁻¹ pour un corps noir a 280 K	
NAST-I	Bande I	600-1800	0,25	0,3 K vers 900 cm ⁻¹	-
	Bande II	1700-3000	0,25	0,5 K vers 2400 cm ⁻¹	
IASI-Ballon	Bande I	600-2000	0,10	Cf. Fig. III.31	[TE01]
	Bande II	1800-3000	0,10	Cf. Fig. III.31	

Tableau IV.2 : Caractéristiques des bandes spectrales des instruments enregistrant les spectres utilisés lors du LIE-2.

Le LPMA doit fournir aux différents intervenants du second LIE les spectres observés ainsi que les simulations de spectres calculés à la résolution infinie (non convolué par la fonction d'appareil) après avoir effectué au préalable l'ajustement et l'inversion des spectres fournissant ainsi aux équipes scientifiques les paramètres d'entrées pour le calcul direct des spectres. Les équipes scientifiques devront calculer les spectres à résolution infinie en utilisant ces données fournies .

Les molécules qui sont prises en considération dans les spectres atmosphériques sont : H₂O, CO₂, O₃, N₂O, CO, CH₄, O₂ NO, SO₂, NO₂ HNO₃, N₂, CCl₃F (CFC-11), CCl₂F₂ (CFC-12), CCl₄. Celles-ci ne sont pas forcément apparentes au niveau des spectres, mais on les introduit dans le calcul direct afin d'effectuer une comparaison la plus poussée possible. L'idée est de voir avec chaque modèle de calcul de transfert radiatif comment dans un cas bien précis, avec des profils verticaux de chaque espèce chimique, ainsi qu'avec un profil de température et

de pression bien spécifiée, on aboutit à un spectre atmosphérique à résolution infinie qui peut être comparé aux autres modèles.

La comparaison des différents modèles de calcul de transfert radiatif pourra ainsi mettre en évidence l'impact des paramètres d'entrée. On s'intéresse en particulier aux différences apparaissant dans les spectres et qui résultent de différences dans les entrées ou les méthodes de calcul dans chaque programme. Afin de mieux comprendre ces différences, on demande à chaque participant du LIE-2 de fournir certaines précisions sur les points qui suivent qui d'après nous introduisent des différences au niveau du calcul de transfert radiatif :

➤ Les sections efficaces

On devra indiquer si les sections efficaces sont pré-calculées ou non à partir des bases spectroscopiques et suivant quelle procédure (linéaire, logarithmique, spline ou autre). De plus si les sections efficaces sont pré-calculées, la grille de températures et de pressions peut jouer sur la qualité des sections efficaces et donc introduire des différences dans le calcul des spectres.

➤ Les micro-fenêtres utilisées

On devra indiquer le découpage du spectre et les bases de données spectroscopiques ainsi que les espèces chimiques prise en compte dans chaque micro-fenêtre. On précisera si l'on emploie un « cut-off » sur l'intensité des raies dans les bases spectroscopiques lors de la prise en compte dans le calcul de raie par raie.

➤ Le choix des continua

On indiquera si l'on prend en compte des continua comme par exemple celui de la vapeur d'eau ou de N_2 et O_2 . On précisera le modèle utilisé (CKD, CKD2.2, Ma – Tipping, MT-CKD, autre).

➤ Le découpage vertical en température et/ou en pression

On indiquera le découpage vertical (du profil de température et de pression en fonction de l'altitude) effectivement utilisé par le code de calcul de transfert radiatif.

➤ Le « Line-mixing »

On indiquera si on prend en compte dans le calcul le « line-mixing » pour CO_2 ou pour CH_4 et on fournira la référence du modèle employé.

➤ prise en compte du flux rétrodiffusé

On indiquera si le modèle de calcul de transfert radiatif prend en compte les phénomènes de rétro-diffusion ou rétro-réflexion du flux solaire et du flux infrarouge.

➤ mode de calcul des profils de raie

On précisera le mode de calcul des profils de raie, le « cut-off » sur les ailes de raie ou on indiquera si on utilise des profils de type non-Voigt.

Toutes ces spécificités seront demandées à chaque groupe scientifique participant au LIE-2 afin d'avoir des points de comparaison et de trouver éventuellement des explications aux différences observées dans les spectres calculés.

IV.4.2 Les spectres du LIE-2

Nous présentons brièvement ici les expériences et les spectres observés qui ont été sélectionnés comme références au calcul direct de transfert radiatif. La comparaison des spectres calculés par les différents groupes scientifiques participant au LIE-2 se fera d'abord à résolution infinie. On pourra ensuite comparer les spectres convolués avec la fonction d'appareil des 3 instruments pour lesquels des spectres observés sont disponibles. Pour cela, le LPMA effectuera la convolution des spectres à résolution infinie par la fonction de réponse spectrale de chaque instrument afin que la convolution et la fonction d'appareil soient bien les mêmes pour chaque spectre simulé pour ne pas introduire de différences supplémentaires.

➤ L'expérience et spectre ARIES

Le Airborne Research Interferometer Evaluation System (ARIES) est un interféromètre infrarouge développé par l'Office Météorologique du Royaume-Uni (UKMO). L'interféromètre possède 2 détecteurs infrarouges selon une disposition en sandwich. Un détecteur MCT couvre la région spectrale entre 600 et 1800 cm^{-1} , le second détecteur, un InSb, couvre la région spectrale entre 1750 et 3000 cm^{-1} .

La résolution spectrale de l'instrument ($\sim 0,5 \text{ cm}^{-1}$) doit permettre la mesure de profils verticaux de la température et de l'humidité dans l'atmosphère.

L'interféromètre embarqué sur un avion C-130 étudie le transfert radiatif dans l'infrarouge thermique afin de préparer la mission spatiale IASI. Les données de ARIES sont également employées pour valider un nouveau modèle de transfert radiatif qui peut simuler des spectres nuageux à la résolution spectrale de IASI afin d'utiliser au mieux les données du satellite.

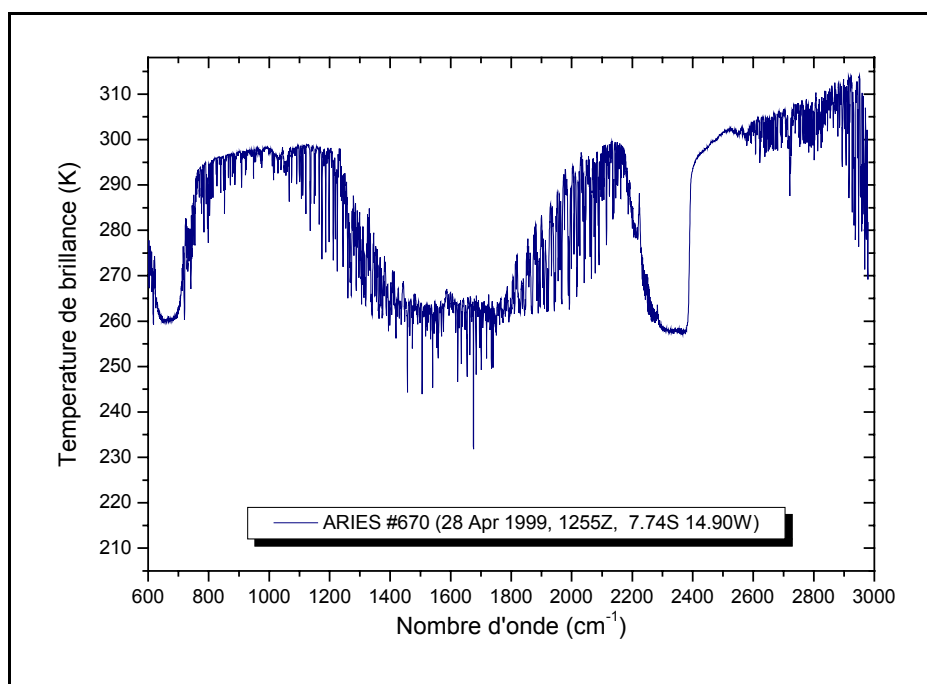


Figure IV.24 : Exemple de spectre en température de brillance ARIES enregistré en avril 1999.

Pour l'exercice LIE-2 les profils des espèces chimiques ainsi que celui de la température et de la pression sont fournis par l'UKMO dans les conditions d'enregistrement du spectre ARIES (Fig. IV.24).

➤ L'expérience et le spectre NAST-I

L'instrument NAST-I est un interféromètre de Michelson de haute résolution, développé par le laboratoire Lincoln du MIT. Il est dérivé du sondeur de haute résolution (HIS) développé par des chercheurs à l'université du Wisconsin. Son objectif est de fournir un outil de validation de l'instrument de NAST.

L'instrument NAST-I est un interféromètre de balayage qui mesure le rayonnement thermique émis à résolution spectrale élevée ($0,25 \text{ cm}^{-1}$) entre $3,3$ et $18 \text{ }\mu\text{m}$. La radiance émise

mesurée est employée pour obtenir des profils de température et de vapeur d'eau de l'atmosphère terrestre. NAST-I produit des données avec 2 km de résolution (au nadir) sur une bande de 40 kilomètres à partir d'une altitude nominale de 20 km à bord d'un avion de la NASA de type ER-2 [\[WEB94\]](#) ou d'un avion de type Proteus (*Fig. IV.25*).



Figure IV.25 : Instrument NAST embarqué sous avion de type Proteus

Le spectre sélectionné pour le LIE-2 (*Fig. IV.26*) à été enregistré le 17 juillet 2001 dans l'Etat de Virginie aux Etats Unis (climat sub-tropical). L'inversion du spectre et la restitution des profils des espèces chimiques ont été réalisés au LPMA.

A l'heure actuelle, nos simulations montrent des problèmes pour reproduire la contribution du CO₂ dans la région de 650 cm⁻¹. On observe un décalage entre la ligne de base du spectre calculé et le spectre observé, ce qui peut éventuellement être expliqué par une variation de l'émissivité en fonction du nombre d'onde. Lors de nos simulations $\epsilon_{surface}$ a été fixée afin de permettre un ajustement de la température de surface. On espère clarifier ce problème lors de la comparaison avec les autres simulations.

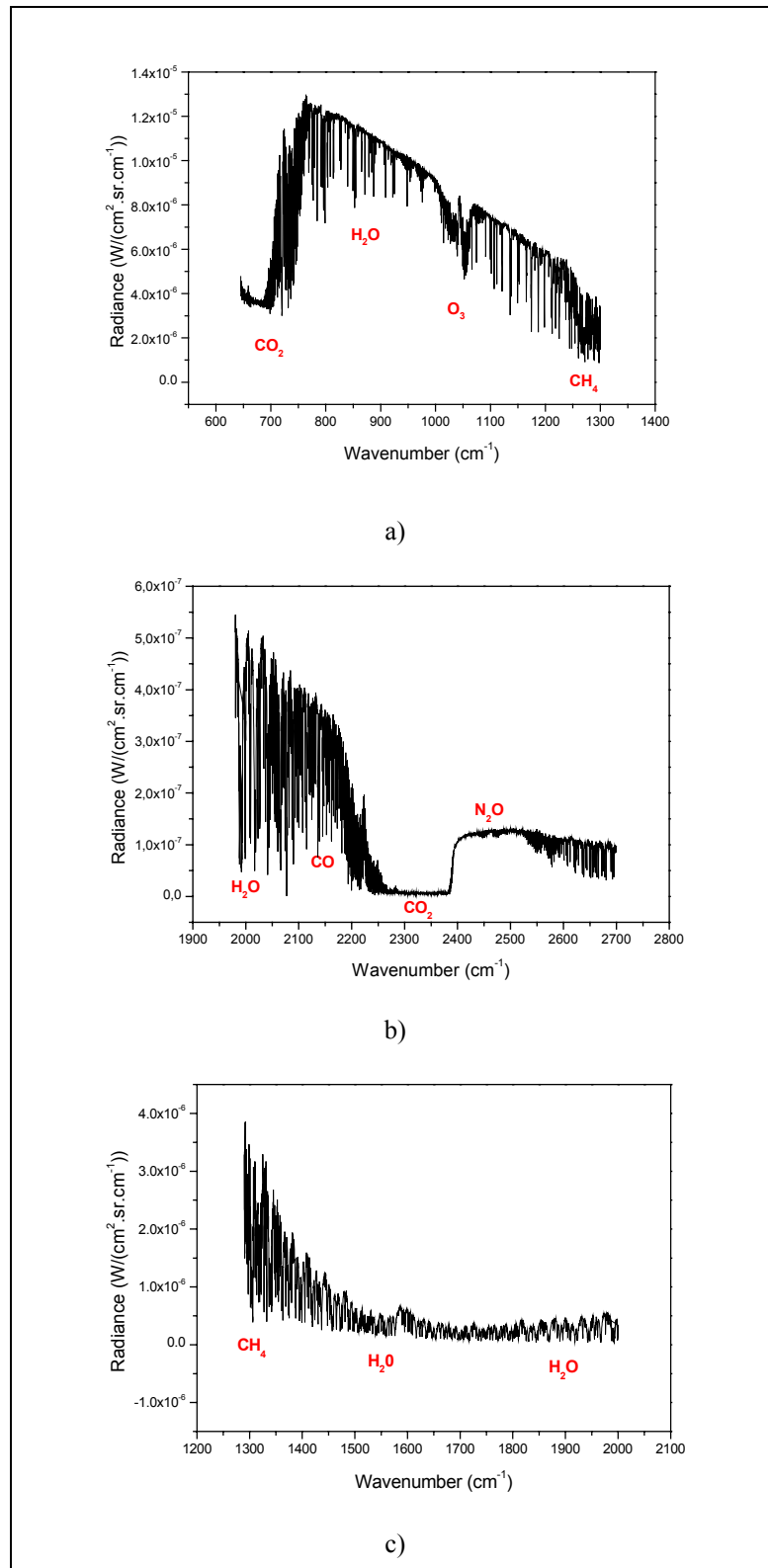


Figure IV.26 : Spectre NAST-I enregistré le 17 juillet 2001 près de la baie de Chesapeake (Etat de Virginie U.S.A.)

➤ L'expérience et le spectre « IASI-Like »

Nous ne reviendrons pas ici sur l'expérience IASI-ballon qui a déjà été décrite dans le chapitre I. Le spectre proposé pour le LIE-2 provient du Vol IASI01 qui c'est déroulé à Kiruna le 13 mars 2001 et que nous avons dégradé spectralement à la résolution de IASI/MetOp. Ce sont les conditions atmosphériques correspondant à ce spectre (que nous avons inversé, voir *Fig. IV.27*) qui seront fournies aux différentes équipes scientifiques afin d'effectuer le calcul du spectre à la résolution infinie.

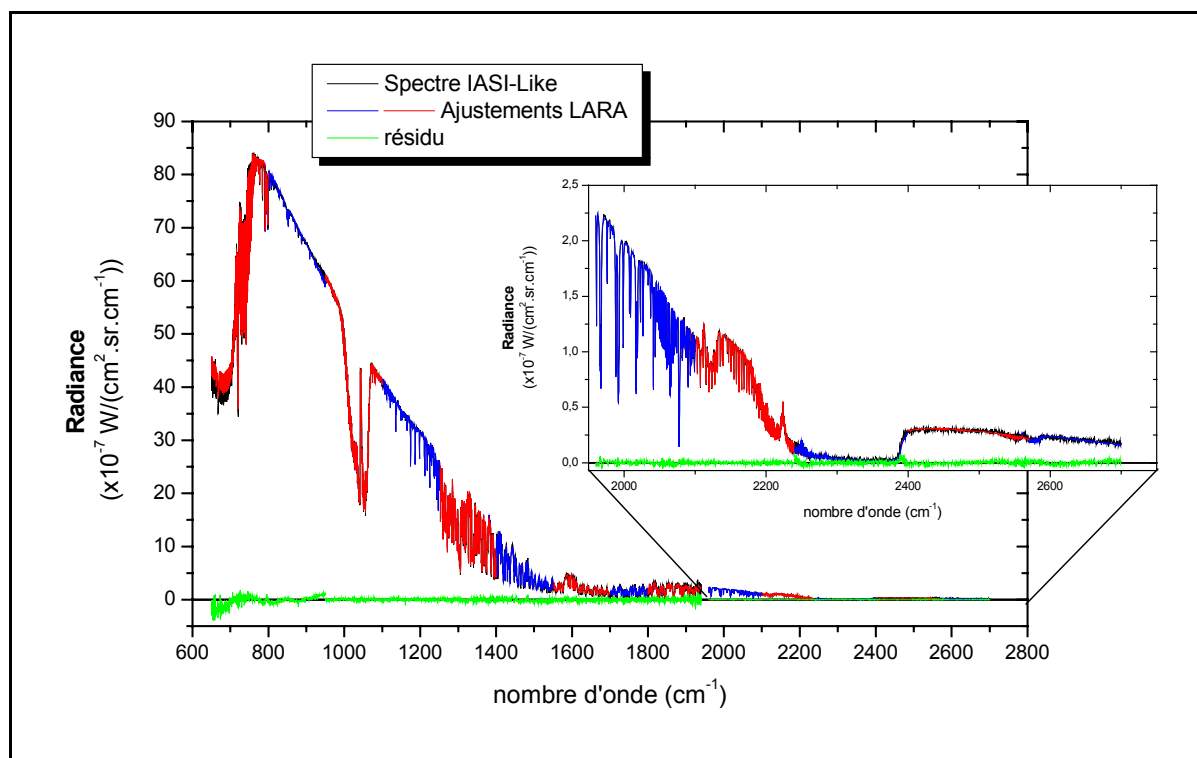


Figure IV.27 : Spectre IASI-like généré à partir d'un spectre IASI-Ballon du vol IASI01.

Pour la première fois nous avons effectué une inversion du spectre IASI dans sa totalité (entre 640 et 2650 cm^{-1}). Les contributions spectrales des espèces chimiques considérées pour le LIE-2 ne permettent pas toutes l'inversion d'une colonne ou d'un profil. Le tableau IV.3 présente le découpage qui a été choisi pour traiter le spectre IASI-like. On y détaille comment les espèces chimiques ont été considérées dans chacune des micro-fenêtres.

Après ajustement du spectre, la température de surface a été fixée et l'inversion de l'émissivité a été effectuée afin de prendre en compte ses variations possibles en fonction du nombre d'onde (*Fig. IV.28*).

On remarque (*Fig. IV.27*) que le spectre calculé dans son ensemble est en assez bon accord avec le spectre IASI-like. Il reste tout de même des régions où l'ajustement est moins

bon et où le résidu est important notamment vers 640 cm^{-1} comme pour le spectre NAST-I et cela même en ajustant l'émissivité. Les autres régions où le résidu est important sont celles en bord de bande pour chaque détecteur (entre 1800 et 1950 cm^{-1} et au-delà de 2500 cm^{-1}). En pratique, on utilise peu ces régions pour la détermination des concentrations des molécules. Les simulations ont tout de même été effectuées pour avoir une idée de la qualité des ajustements.

Micro-fenêtre (en cm^{-1})	Espèces chimiques sélectionnées pour le LIE-2														
	H ₂ O	CO ₂	O ₃	N ₂ O	CO	CH ₄	O ₂	NO	SO ₂	NO ₂	HNO ₃	N ₂	CCl ₂ F ₂ (CFC12)	CCl ₃ F (CFC11)	CCl ₄
650-850	2	2	2	-	-	-	-	-	-	1	1	-	-	-	4
790-950	2	2	-	-	-	-	-	-	-	1	1	-	4	4	4
950-1100	2	2	1	2	-	2	-	-	3	-	-	-	-	-	-
1100-1250	2	-	2	1	-	1	-	-	-	-	1	-	-	-	-
1250-1400	1	-	2	1	-	1	3	-	3	-	1	-	-	-	-
1380-1550	1	-	2	1	-	2	3	-	-	-	-	-	-	-	-
1540-1710	2	-	2	-	-	3	3	-	-	1	1	-	-	-	-
1700-1850	2	-	2	-	-	-	3	3	-	-	1	-	-	-	-
1800-1940	2	2	-	-	-	-	-	3	-	-	-	-	-	-	-
1960-2100	2	1	2	2	1	-	-	3	-	-	-	-	-	-	-
2080-2250	2	1	2	2	1	-	-	-	-	-	-	3	-	-	-
2240-2400	2	2	-	2	2	3	-	-	-	-	-	3	-	-	-
2380-2570	2	2	-	2	-	3	-	-	3	-	-	3	-	-	-
2550-2700	2	-	-	2	-	3	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Tableau IV.3 : Fenêtres utilisées pour les simulations avec la sélection des espèces chimiques à considérer suivant le domaine spectral.

- [-] espèces chimiques non présentes ou dont les intensités de raies sont trop faibles pour être identifiées dans le spectre (compte tenu du bruit).
- [1] espèces chimiques présentes dans la fenêtre de manière prépondérante et pour lesquelles on a assez d'information pour effectuer éventuellement un ajustement de profil ou de colonne.
- [2] espèces chimiques présentes dans la fenêtre et dont on fixe le profil (ajusté dans une autre fenêtre).
- [3] espèces chimiques présentes dans la fenêtre et prises en compte dans le calcul, mais dont l'influence est relativement faible.
- [4] espèces chimiques présentes et dans la fenêtre, mais dont il est difficile de vérifier la qualité de la simulation du fait de la présence de nombreuses raies d'espèces différentes.

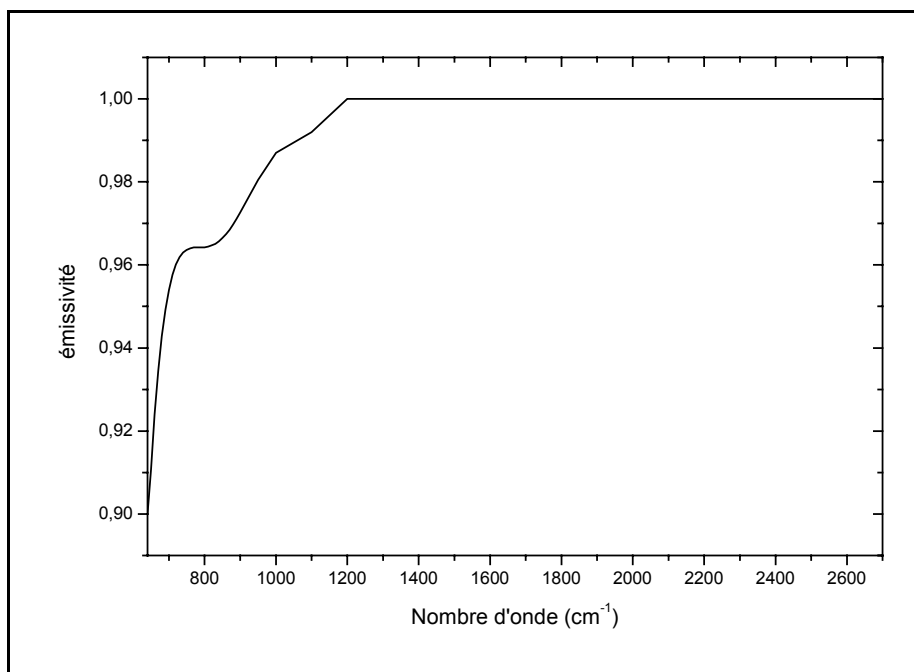


Figure IV.28 : Variation de l'émissivité en fonction du nombre d'onde d'après l'ajustement à partir du spectre IASI-like proposé pour le LIE-2.

En effectuant ce second exercice d'intercomparaison de codes de calcul de transfert radiatif, on espère mettre en évidence les différences qui résultent des modèles eux-mêmes comme par exemple l'emploi de modèles différents pour simuler le continuum de la vapeur d'eau. Les différences entre les codes de calcul pourront aussi être étudiées en fonction du découpage vertical utilisé pour la pression et la température. On examinera si les différents codes conduisent à des différences dans le résidu observé de l'ozone dans la bande à 10 μm . On espère ainsi par ces comparaisons apporter des éléments qui permettront d'améliorer les algorithmes de calcul de transfert radiatif et de mettre en évidence des régions spécifiques où les modèles doivent être améliorés pour avoir des spectres plus « réalistes ». On pourra en particulier montrer où il faut améliorer les banques de données spectroscopiques et où il faut utiliser des codes de calcul plus sophistiqués (formes de raies, interférences entre raies, continua, ...).

IV.5 Conclusion

Les résultats présentés dans ce chapitre ont montré qu'il était possible d'effectuer à partir des spectres enregistrés par le second vol IASI02. L'inversion des colonnes de CO, N₂O et CH₄ dans les régions spectrales appropriées avec des spectres calculés en assez bon accord avec les spectres observés.

Les noyaux moyens ainsi que les fonctions de poids ont montré qu'il restait difficile à partir de spectres expérimentaux et de l'algorithme d'inversion de restituer les profils verticaux. Le travail effectué sur les spectres dégradés à la résolution de IASI/MetOp a permis de montrer qu'on pourra avoir accès aux colonnes des constituants atmosphériques avec un bon accord avec les inversions effectuées sur les spectres IASI-ballon.

Certains de ces résultats ont servi à la validation de l'instrument SCIAMACHY et contribuent aussi à la préparation de IASI, comme la mise en place par le LPMA du second exercice d'intercomparaison des codes de calcul de transfert radiatif de type raie par raie. Lors de la préparation du LIE-2, nous avons pu montrer qu'il était possible d'effectuer l'inversion sur la totalité du spectre avec un assez bon accord général. Certaines régions spectrales montrent encore des résidus notables entre spectres simulés et spectres observés. On espère que le LIE apportera des réponses par la comparaison des simulations entre elles et par l'analyse des différences entre les spectres observés (3 cas pour des instruments différents) et les spectres simulés par différents modèles.

Cellule à gaz (photo LPMA)



CHAPITRE V

Modélisation d'une cellule à gaz pour la calibration de l'instrument IASI/MetOp.

En parallèle au travail effectué sur le traitement des spectres de l'expérience IASI-ballon, une étude a été réalisée pour l'élaboration d'une cellule à gaz ayant pour objectif la calibration de l'instrument et la détermination de la réponse spectrale de l'instrument IASI.

Pour réaliser ce projet, la simulation de spectres a été nécessaire et une modification de l'algorithme de transfert radiatif LARA a dû être effectuée. Afin de pouvoir ensuite créer une cellule à gaz qui puisse être utilisée dans le cadre de la caractérisation de la réponse spectrale de l'instrument IASI, certaines simulations ont été faites pour choisir les espèces chimiques

appropriées. Les espèces retenues devraient présenter des signatures spectrales dans chacune des bandes couvertes par l'instrument.

Les simulations qui ont été faites tiennent compte de la transmission et de l'émission des gaz et nous avons également modélisé la transmission des lames de la cuve afin de préparer l'étude qui permettra le traitement, par l'algorithme opérationnel 4A [SCO81], des spectres de cuve mesurés lors des essais en vide thermique au centre européen de recherche et technologie spatiale (ESTEC) de l'Agence Spatiale Européenne aux Pays Bas.

V.1 Simulations et sélection du mélange gazeux de la cellule

V.1.1 Objectifs et prérogatives de la cellule

Le projet de fabrication d'une cellule a gaz est lié à la nécessité d'effectuer des tests de qualification et de performances sur l'instrument IASI quand celui ci est intégré à la plate-forme satellitaire MetOp. Les tests ont été effectués en chambre blanche afin de reproduire les conditions spatiales nominales et extrêmes de fonctionnement de l'instrument. Les tests avec la cellule à gaz ont deux objectifs : le premier est de tester l'instrument et d'effectuer l'enregistrement d'un spectre dont on connaît au préalable les caractéristiques en fonction du mélange gazeux présent dans la cellule (c'est donc un spectre réel). Le deuxième point concerne la détermination de la fonction d'appareil de l'instrument, c'est-à-dire la contribution instrumentale de IASI mais éventuellement celle de la plate-forme MetOp qui peut introduire des perturbations supplémentaires lors de l'enregistrement des spectres.

Pour atteindre ces objectifs et déterminer les caractéristiques de cette cellule, une étude consistant à réaliser des simulations avec différents mélanges gazeux a été réalisée par le LPMA à la demande du CNES. Ces simulations ont demandé une modification des algorithmes de calcul de transfert radiatif que nous utilisons habituellement lors du traitement des spectres atmosphériques.

Nous avons établi un certain nombre de critères concernant les résultats recherchés lors de nos simulations. Ils sont énumérés ci-dessous :

- La signature du ou des gaz employés doit couvrir les 3 bandes spectrales couvertes par l'instrument IASI ($650 - 1210 \text{ cm}^{-1}$; $1210 - 2000 \text{ cm}^{-1}$; $2000 - 2760 \text{ cm}^{-1}$). Ceci oblige à considérer un mélange de plusieurs composés gazeux.
- L'intensité des raies exploitables devra être 10 fois supérieure au bruit de IASI. Le bruit correspond au bruit radiométrique de type 1c (*cf. Fig. I.18*) pour un corps noir de référence à 280 K).
- Les raies présentes doivent être suffisamment isolées pour permettre l'étude et la détermination précise de la fonction réponse spectrale de l'instrument (ISRF = Instrument Spectrale Reponse Function).
- Lors des simulations, le spectre à résolution infinie est convolué par une fonction sinus cardinal calculée avec un faible amortissement permettant ainsi de bien voir les « ailes » et « pieds » des raies. La fonction d'appareil qui a été utilisée pour ces simulations est un sinus cardinal sur un domaine spectral de 50 cm^{-1} . La largeur à mi-hauteur est de $0,30 \text{ cm}^{-1}$ (*Fig. V.1*). Les spectres calculés (spectre à résolution infinie et ensuite convolués avec cette fonction d'appareil) sont générés avec un pas d'échantillonnage de $0,25 \text{ cm}^{-1}$. Lors du traitement des spectres on travaillera sur des spectres non apodisés dits de niveau 1b.

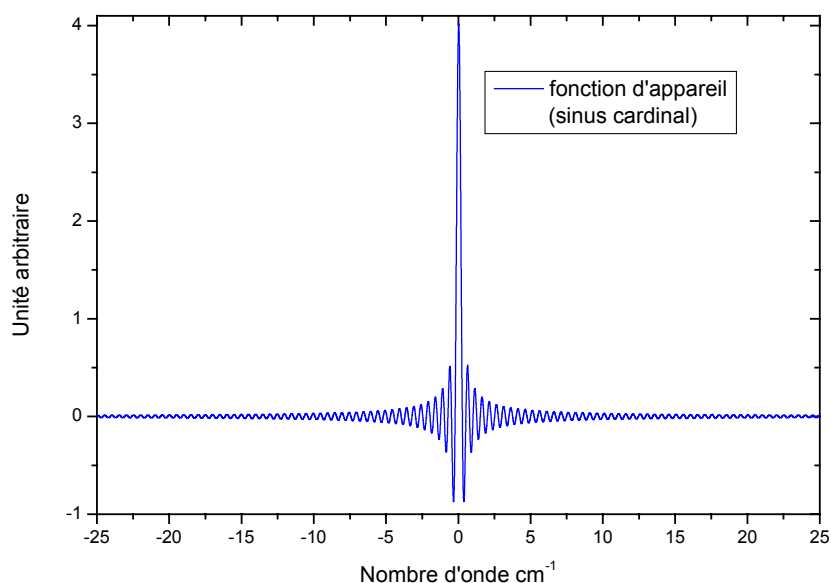


Figure V.1: Fonction d'appareil utilisée pour la convolution des spectres simulés de la cuve.

- Le trajet optique est pris égal à 12 cm correspondant à la longueur de la cellule à gaz.
- Les raies doivent être suffisamment fines pour accéder au mieux à la fonction d'appareil. On doit minimiser la largeur de raies c'est-à-dire minimiser l'élargissement dû aux effets collisionnels (pour une température fixée). On devra donc jouer sur la pression totale du mélange gazeux pour réduire l'élargissement. On choisit comme critère le rapport entre la largeur Lorentz et la largeur Doppler $\left(\frac{\gamma_L}{\gamma_D}\right)$ qui ne doit pas dépasser 10%.
- La température du corps noir équivalent (température du fond de la cuve) est prise à 90 K. Cette température correspond à la température du corps noir cryogénique qui sera positionné du coté opposé au miroir d'entrée de l'instrument.
- La pression totale doit être faible (moins de 20 hPa)

V.1.2 Détermination des gaz dans la cellule

Pour sélectionner les espèces chimiques à utiliser dans la cellule, il faut faire attention à la stabilité du mélange. Lors de la variation de température de la cellule et donc du mélange gazeux, il ne faut pas qu'il y ait changement d'état physique, ni que les espèces réagissent chimiquement entre elles. Notre choix de molécules pour réaliser les simulations a porté sur des espèces dont on possède une base spectroscopique fiable et qui présentent un intérêt atmosphérique. Nous avons choisi initialement CO, CO₂, CH₄ et éventuellement H₂O. Par la suite nous avons considéré NH₃ pour mieux couvrir les bandes B1 et B2. C'est pour avoir des raies relativement intenses dans les différentes bandes de IASI et pour éviter les incompatibilités chimiques que notre choix s'est porté dans un premier temps sur ces cinq molécules.

Les seules espèces présentes à la fois dans les 3 bandes sont H₂O et CO₂. Dans le cas de H₂O, la molécule est principalement active dans l'intervalle 1300-2000 cm⁻¹. Des raies sont tout de même présentes dans la bande 1. Elles sont bien séparées et la fonction d'appareil y est observable. Le problème pour ces raies de la bande 1 est leur intensité (*Fig. V.2*). Si l'on veut que celles-ci soient observables avec un rapport de 10/1 par rapport au bruit IASI, il faut

augmenter la quantité de H₂O et donc la pression partielle de ce constituant. Cela entraîne la perte de lisibilité pour les autres raies, dans les autres bandes. En effet, les raies de H₂O sont relativement « serrées » dans la région 1300 – 2000 cm⁻¹. Leurs intensités relativement fortes et un élargissement par la pression gêneraient l'exploitation des signatures spectrales d'autres espèces comme CH₄ qui absorbent dans cette même région.

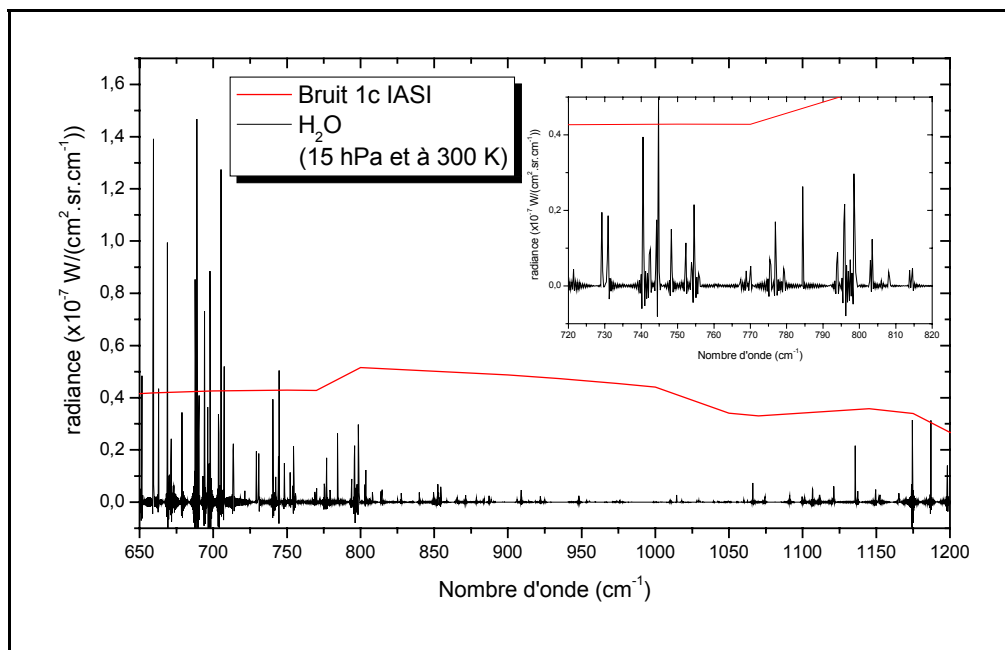


Figure V.2 : Spectre d'émission calculé pour H₂O dans la bande 1 et bruit (niveau 1c) de IASI correspondant. Le zoom illustre la bonne contribution de la fonction d'appareil (sinus cardinal) dans les raies mais avec des oscillations en dessous du bruit.

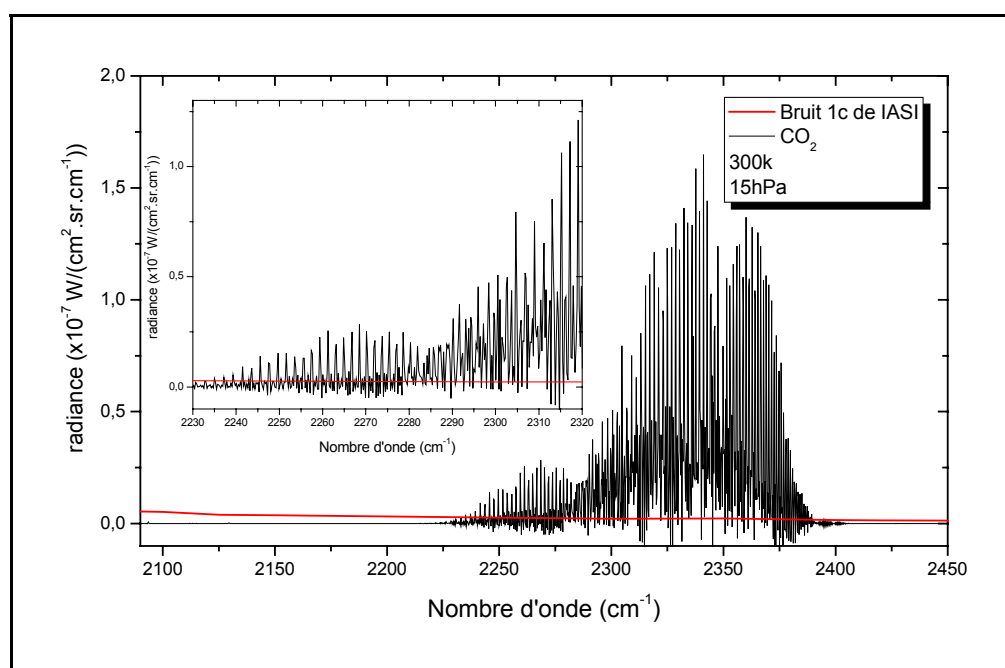


Figure V.3 : Spectre d'émission calculé de CO₂ dans la bande 3 à 300 K et pour une pression totale de 15 hPa.

CO₂ est à la fois présent dans les bandes 1, 2, et 3 mais l'intensité des raies est très inégale entre chacune des bandes. Cela nécessite de considérer un autre gaz pour la bande 2 (1210 - 2000 cm⁻¹) où pour le CO₂ les intensités des raies sont très en dessous du bruit de IASI pour les pressions employées lors des simulations. De même pour la bande 3 (2000 – 2760 cm⁻¹) les raies de CO₂ sont trop proches les unes des autres pour être utilisées (*Fig. V.3*). La seule zone où l'on pourrait exploiter les raies de CO₂ serait donc dans la bande 1 (650 – 1210 cm⁻¹). CO pourrait être employé dans le mélange gazeux dans la bande 3 à condition que le rapport de mélange de CO₂ soit assez faible pour que les raies restent peu saturées et ne gênent pas CO dans la zone aux alentours de 2200 cm⁻¹. Cela reste tout de même un mélange peu favorable dans la bande 2 du fait de la proximité des bandes de CO et de CO₂ et de la faible intensité des raies de CO dans cette région.

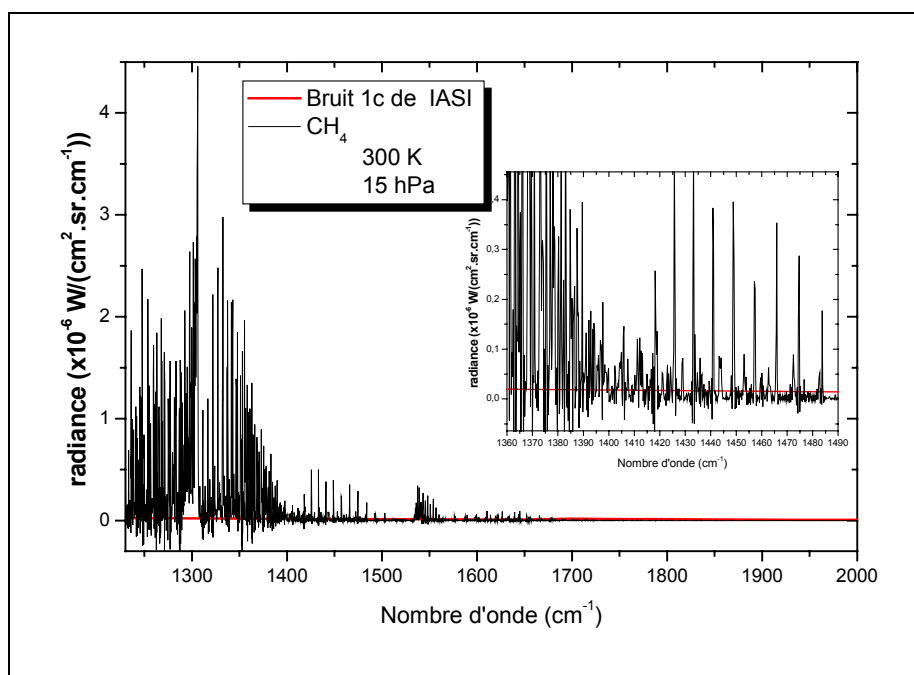


Figure V.4 : Spectre d'émission calculé de CH₄ dans la bande 2

Le méthane (CH₄) est observé principalement dans la bande 2 pour une température de 330 K et une pression de 15 hPa on observe un signal très largement au-dessus du bruit (*Fig. V.4*). On peut donc envisager d'utiliser CH₄ avec d'autres gaz. La pression partielle pouvant être assez petite, le signal sera effectivement 10 fois supérieur au bruit de IASI.

On constate lors des simulations que le spectre calculé avec CH₄ possède des raies suffisamment distantes pour pouvoir analyser la fonction d'appareil. Mais ces raies ne sont pas très nombreuses ni suffisamment intenses pour que CH₄ soit un gaz vraiment intéressant pour le remplissage de la cellule. Un mélange gazeux de CH₄, CO et CO₂ ne peut pas être envisagé à

cause des recouvrements des raies et de l'absence de raies exploitables dans la bande spectrale 3 de IASI.

Une molécule prise en compte dans les bases spectroscopiques a la particularité d'être présente principalement dans les bandes 1 et 2, sans être présente dans la bande 3 ; c'est la molécule NH_3 . Un mélange gazeux de CO et NH_3 semble être le meilleur compromis qui permet à la fois d'observer des raies dans les trois bandes de IASI (Fig. V.5) et avec des espacements suffisant pour l'analyse de la fonction d'appareil sur un domaine spectrale large. Un mélange équimolaire est possible du fait que les intensités des raies sont du même ordre de grandeur.

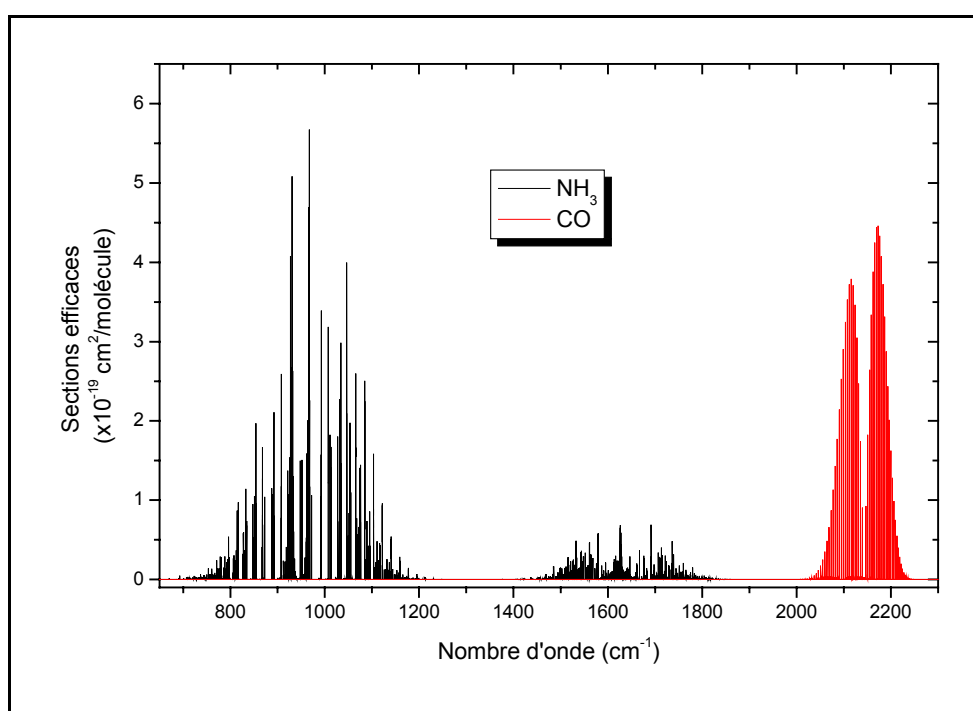


Figure V.5 : Sections efficaces de la base HITRAN 2000 pour CO et NH_3 dans la région $650\text{-}2300\text{ cm}^{-1}$.

V.1.3 Tests sur NH_3 et CO

Une fois que le choix du mélange gazeux NH_3 et CO a été fixé (il permet de couvrir au mieux les 3 bandes de IASI), il reste à vérifier que ce mélange à la pression de remplissage de la cellule à gaz permet l'étude de la fonction d'appareil. Il faut que les raies soient d'intensité suffisante par rapport au bruit IASI et que les raies soient fines, c'est-à-dire

que le rapport entre la largeur à mi-hauteur de la composante lorentzienne de la raie et la largeur à mi-hauteur de la composante gaussienne $\left(\frac{\gamma_L}{\gamma_D}\right)$ soit au plus de 10 % environ.

Les figures V.6, V.7 et V.8 montrent la simulation d'un spectre en émission d'un mélange composé de 30% de NH_3 et 70% de CO pour une pression totale de 7 hPa et à 345K. On constate que le bruit très largement inférieur (facteur 10 assuré) aux intensités des raies dans les trois bandes. Les raies de NH_3 dans la bande 1 et les raies de CO dans la bande 3 sont assez bien espacées pour permettre l'étude de la fonction d'appareil. On y voit bien les oscillations dans les ailes de raies qui proviennent de la convolution avec le sinus cardinal qui est la réponse spectrale de l'instrument dans nos simulations. Il est plus délicat d'observer les raies de NH_3 isolées dans la bande 2 du fait qu'elles sont beaucoup plus rapprochées les unes des autres. Mais certaines régions spectrales sont exploitables notamment autour 1700 cm^{-1} .

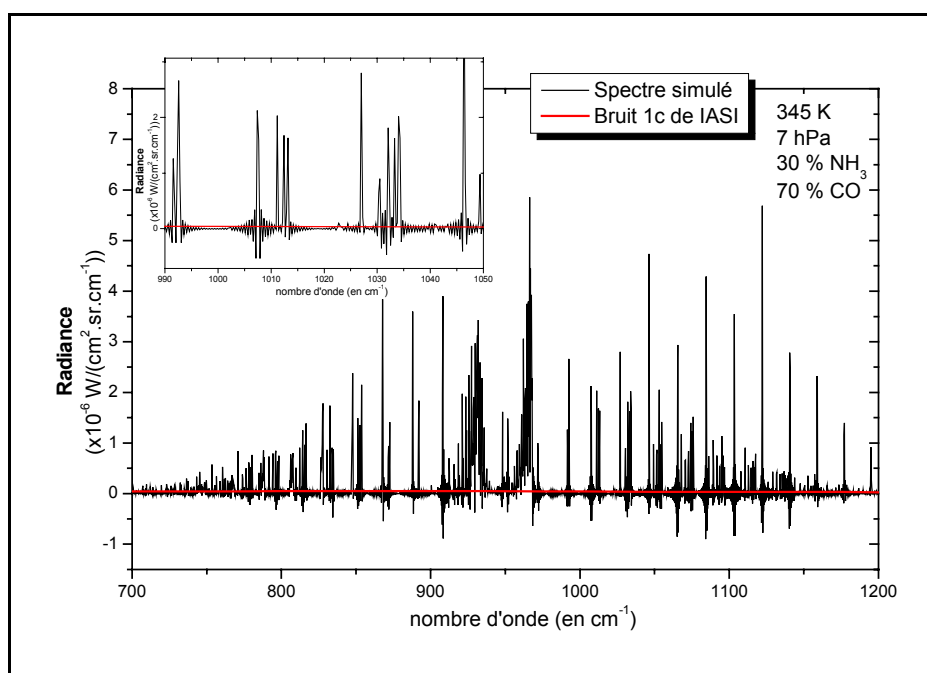


Figure V.6 : Spectre d'émission convolué dans la bande 1 de IASI (raies de NH_3) à basse pression et température élevée.

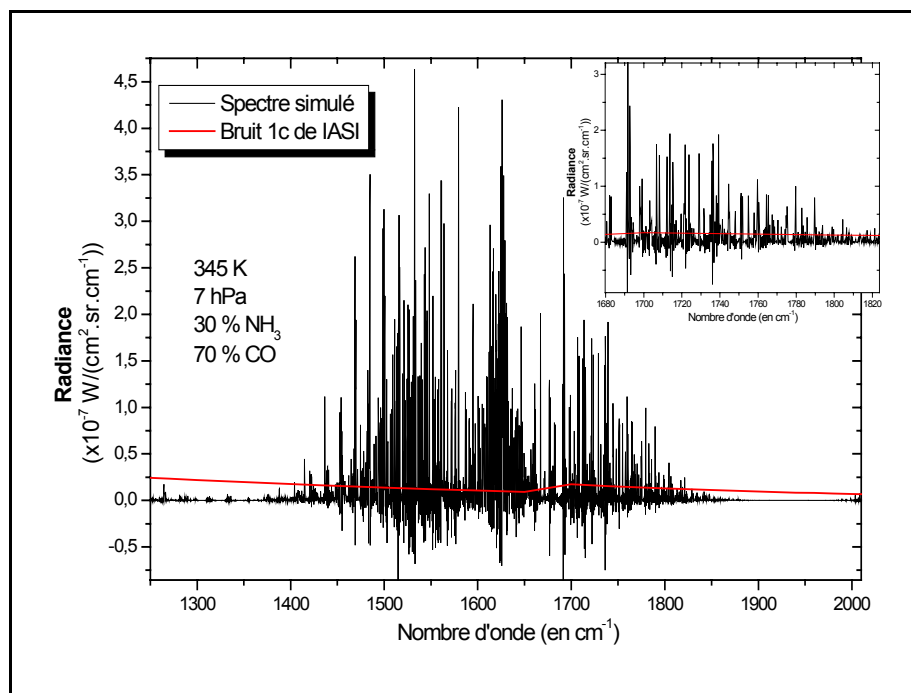


Figure V.7 : Spectre d'émission convolué dans la bande 2 de IASI (raies de NH_3) à basse pression et température élevée.

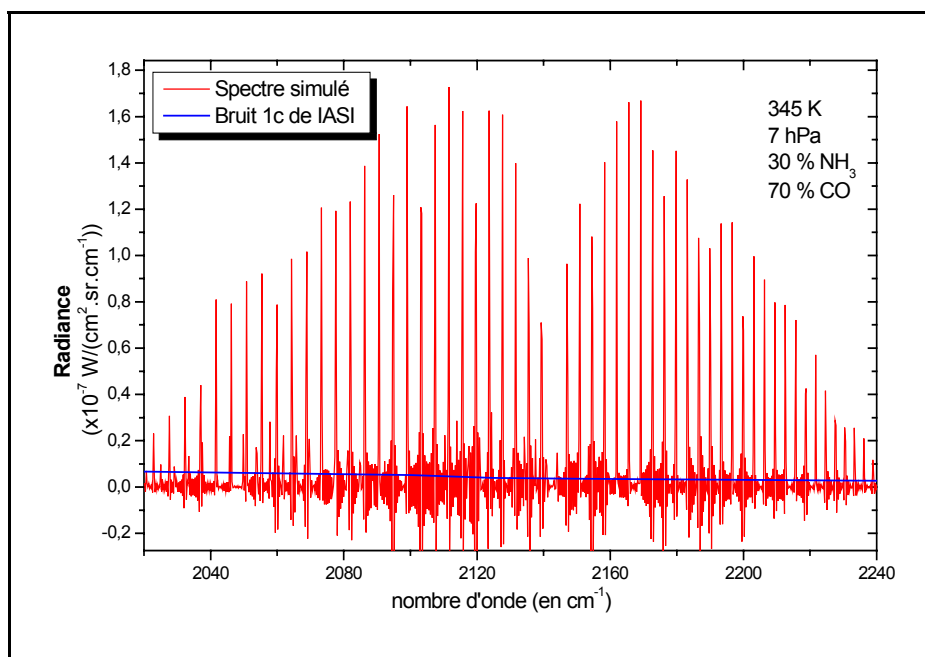


Figure V.8 : Spectre d'émission convolué dans la bande 3 de IASI (raies de CO) à basse pression et température élevée.

Afin de faciliter l'analyse de la fonction d'appareil, les largeurs de raies doivent être les plus petites possible. Il faut jouer sur la composante lorentzienne du profil de Voigt des raies. Nous avons deux paramètres sur lesquels il est possible d'intervenir afin de réduire cette composante. A pression constante la largeur de la composante Lorentz diminue lorsque la température du gaz augmente. On explique cette constatation en disant qu'en diminuant la température les collisions sont plus lentes et donc l'interaction entre molécules dure plus

longtemps, augmentant par la même occasion le γ_L des raies. Le second paramètre est la pression totale du gaz : en l'abaissant, on réduit la largeur des raies. Les principaux facteurs auxquels nous nous sommes intéressés dans nos simulations sont la pression et la température de manière à ce que les intensités des raies les plus intenses restent toujours supérieures à un facteur 10 par rapport au bruit IASI. Ceci nous a amené à considérer des mélanges non équimolaires entre CO et NH₃.

Un aspect est mal maîtrisé dans nos simulations : les coefficients d'élargissement des raies de CO par collisions avec NH₃ et réciproquement ceux de NH₃ par collisions avec CO ne nous sont pas connus (*cf.* 2.20 et 2.21). Nous avons donc effectué deux séries de simulations. Dans un premier cas l'élargissement de Lorentz ne prend en compte que l'auto-élargissement de la molécule considérée (information contenue dans les bases spectroscopiques). Dans le second cas l'élargissement par l'air est pris en compte dans le calcul de la largeur de Lorentz en supposant que le partenaire de collision a le même effet que celui de l'air. On estime ainsi faire un encadrement de la valeur réelle de la largeur de la composante lorentzienne. Les résultats dans le tableau V.1 et V.2 sont obtenus à partir d'une raie de NH₃ dans la bande 2 de IASI. Dans le tableau V.1 la composante lorentzienne du profil de la raie est déterminée en prenant en compte l'auto-élargissement et en simulant l'élargissement par l'autre gaz du mélange en supposant que c'est de l'air. Dans le tableau V.2 l'élargissement par l'air n'est pas pris en considération, seul l'auto-élargissement est pris en compte dans la composante lorentzienne.

	T=300K				T=330K				T=345K			
	7,389 hPa	9,488 hPa	12,182 hPa	15,642 hPa	7,389 hPa	9,488 hPa	12,182 hPa	15,642 hPa	7,389 hPa	9,488 hPa	12,182 hPa	15,642 hPa
Largeur de Doppler	0,00259 cm ⁻¹	0,00259 cm ⁻¹	0,00259 cm ⁻¹	0,00259 cm ⁻¹	0,00272 cm ⁻¹	0,00272 cm ⁻¹	0,00272 cm ⁻¹	0,00272 cm ⁻¹	0,00278 cm ⁻¹	0,00278 cm ⁻¹	0,00278 cm ⁻¹	0,00278 cm ⁻¹
Largeur de Lorentz	0,00033 cm ⁻¹	0,00043 cm ⁻¹	0,00055 cm ⁻¹	0,00070 cm ⁻¹	0,00031 cm ⁻¹	0,00040 cm ⁻¹	0,00051 cm ⁻¹	0,00066 cm ⁻¹	0,00030 cm ⁻¹	0,00039 cm ⁻¹	0,00050 cm ⁻¹	0,00064 cm ⁻¹
LL/LD en %	12,82	16,48	21,16	27,17	11,46	14,7	18,89	24,29	10,87	13,95	17,92	23,01
Largeur De Voigt	0,00277 cm ⁻¹	0,00283 cm ⁻¹	0,00289 cm ⁻¹	0,00299 cm ⁻¹	0,00289 cm ⁻¹	0,00294 cm ⁻¹	0,00300 cm ⁻¹	0,00309 cm ⁻¹	0,00294 cm ⁻¹	0,00299 cm ⁻¹	0,00305 cm ⁻¹	0,00313 cm ⁻¹

Tableau V.1 : Composantes du profil de raies de NH₃ dans la bande 2 (vers 1667 cm⁻¹) de IASI avec la prise en compte de l'auto élargissement et de l'élargissement par l'air (simulant l'autre partenaire de collision) dans la composante lorentzienne.

	T=300K				T=330K				T=345K			
	7,389 hPa	9,488 hPa	12,182 hPa	15,642 hPa	7,389 hPa	9,488 hPa	12,182 hPa	15,642 hPa	7,389 hPa	9,488 hPa	12,182 hPa	15,642 hPa
Largeur de Doppler	0,00259 cm ⁻¹	0,00259 cm ⁻¹	0,00259 cm ⁻¹	0,00259 cm ⁻¹	0,00272 cm ⁻¹	0,00272 cm ⁻¹	0,00272 cm ⁻¹	0,00272 cm ⁻¹	0,00278 cm ⁻¹	0,00278 cm ⁻¹	0,00278 cm ⁻¹	0,00278 cm ⁻¹
Largeur de Lorentz	0,00029 cm ⁻¹	0,00037 cm ⁻¹	0,00048 cm ⁻¹	0,00061 cm ⁻¹	0,00027 cm ⁻¹	0,00035 cm ⁻¹	0,00045 cm ⁻¹	0,00057 cm ⁻¹	0,00026 cm ⁻¹	0,00034 cm ⁻¹	0,00043 cm ⁻¹	0,00056 cm ⁻¹
LL/LD en %	11,16	14,33	18,40	23,63	9,96	12,79	16,43	21,09	9,45	12,13	15,58	20,01
Largeur De Voigt	0,00275 cm ⁻¹	0,00279 cm ⁻¹	0,00285 cm ⁻¹	0,00293 cm ⁻¹	0,00286 cm ⁻¹	0,00291 cm ⁻¹	0,00296 cm ⁻¹	0,00304 cm ⁻¹	0,00292 cm ⁻¹	0,00296 cm ⁻¹	0,00302 cm ⁻¹	0,00309 cm ⁻¹

Tableau V.2 : Composantes du profil de raies de NH₃ dans la bande 2 (vers 1667 cm⁻¹) de IASI en ne considérant que l'auto-élargissement de la molécule dans la composante lorentzienne du profil de raie.

On constate que la largeur de la composante de Doppler varie peu en fonction de la température (dépendance en \sqrt{T}). Au contraire la composante lorentzienne est très sensible aux variations de pression : celle-ci double quand la pression augmente d'un facteur 2. La prise en compte de l'élargissement par l'air fait apparaître pour une même pression et une même température une différence notable avec les valeurs calculées en ne considérant que l'auto-élargissement de la molécule. La comparaison du rapport entre la largeur Lorentz et la largeur Doppler (LL/LD) montre que la pression est le facteur prédominant pour obtenir des raies fines. Les valeurs dans les Tableaux V.1 et V.2 (que l'on estime encadrer les largeurs Lorentz avec l'élargissement de NH₃ par CO et l'auto élargissement de NH₃) font apparaître deux voies envisageables. On peut jouer sur l'effet de température : plus elle est élevée et plus le rapport LL/LD diminue. En fait la composante lorentzienne ne diminue pas vraiment c'est la composante Doppler qui augmente. Entre 300 K et 330 K la largeur Doppler augmente de $13 \cdot 10^{-5}$ cm⁻¹ et entre 330 et 345 K elle augmente encore de $6 \cdot 10^{-5}$ cm⁻¹. Mais nous cherchons à réduire la largeur totale de la raie et donc prendre une température élevée n'est pas forcément la solution à envisager.

La deuxième approche pour réduire la largeur reste donc l'abaissement de la pression total au sein de la cellule. Une pression totale autour de 10 hPa semble être un bon compromis entre une pression faible et une quantité de molécules suffisante pour avoir un signal notablement supérieur au bruit de l'instrument.

Pour les simulations et la comparaison avec les spectres de la cellule nous avons considéré en définitive 2 cas : un cas à 298 K et une pression à 10 hPa et un cas à 313 K à la même pression de 10 hPa.

V.2 Modélisation de la transmission à travers la cuve

V.2.1 Prise en compte de la cellule

Nos simulations de spectres ont conduit à la réalisation par le LPMA de 2 cellules à gaz avec un mélange de CO et NH₃. Les cellules ont été équipées avec des fenêtres en ZnSe. L'effet de ces fenêtres n'a pas été pris en compte initialement lors de nos simulations. Les spectres simulés ont été fournis par le LPMA au CNES et à Noveltis pour faire une première modélisation des résultats.

Les spectres calculés pour la cellule CO/NH₃ l'ont été en faisant l'hypothèse d'un fond à l'entrée de la cellule correspondant à un corps noir à $T_{\text{fond}} = 90$ K. Deux cas ont été simulés pour des températures du mélange de 298 K et 313 K avec une pression totale de 10 hPa (Fig. V.9 et V.10). Ces spectres doivent être considérés comme une situation de référence qui doit servir à Noveltis pour tester la version de 4A (algorithme opérationnel) qui sera utilisée pour l'exploitation des spectres IASI.

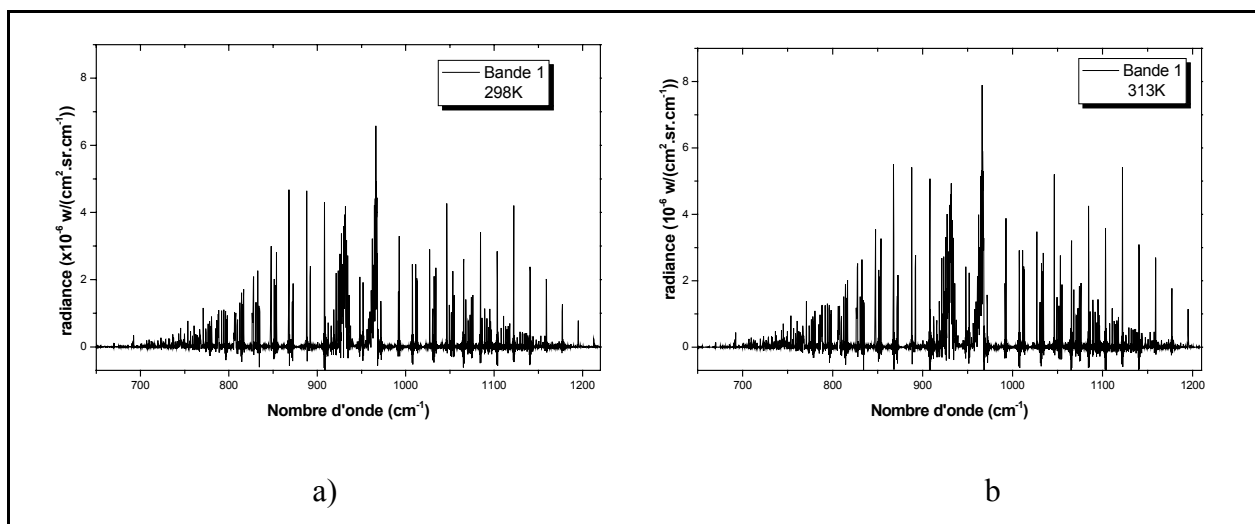


Figure V.9: Simulation pour la bande 1 de IASI du mélange gazeux de CO/NH₃ pour 2 températures (298 K et 313 K) et pour une pression de 10 hPa.

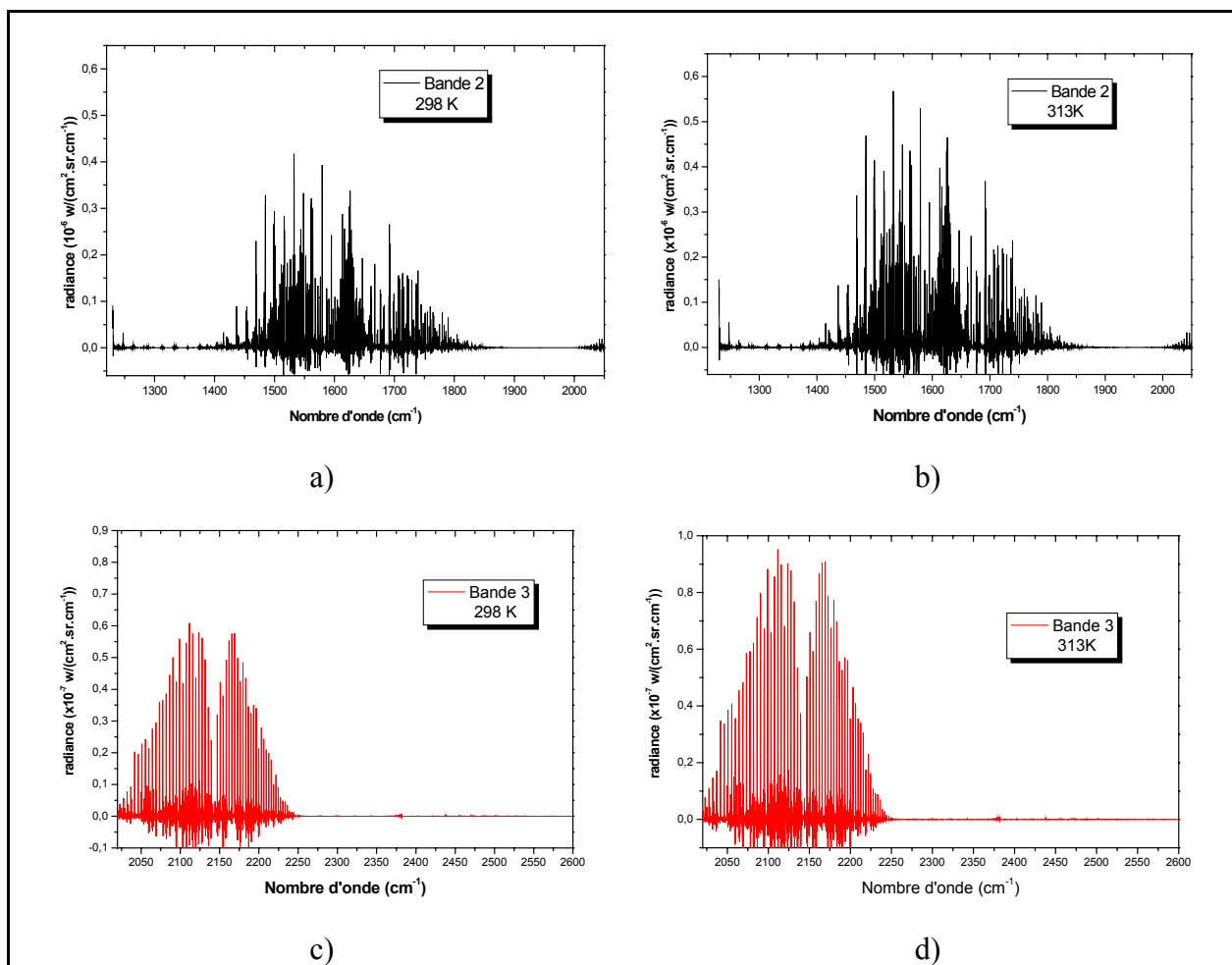


Figure V.10: Simulation pour la bande 2 et 3 de IASI du mélange gazeux de CO/NH₃ pour 2 températures (298 K et 313 K) et pour une pression de 10 hPa.

Si on doit utiliser un modèle d'inversion pour l'exploitation détaillée des spectres de la cellule et pour l'étude de la réponse spectrale de l'instrument, il est nécessaire de savoir modéliser le mélange gazeux mais il faut aussi prendre en considération l'influence des lames qui ferment la cellule. L'influence de ces lames en ZnSe doit être modélisée et incorporée dans le modèle, si elles ont un effet sur la reproduction de l'ensemble des spectres.

Dans un premier cas on peut considérer la transmission CNF + gaz (CO/NH₃) + IASI, c'est-à-dire la transmission/émission du gaz depuis le Corps Noir froid (= CNF) jusqu'à l'entrée de l'instrument IASI. Les lames de ZnSe sont alors considérées comme n'ayant qu'un impact négligeable sur le signal arrivant sur les détecteurs de IASI. On a dans ces conditions:

$$S_1(\tilde{\nu}) = B(\tilde{\nu}, T_{fond}) T_r(\tilde{\nu}, P, T) + B(\tilde{\nu}, T) [1 - T_r(\tilde{\nu}, P, T)] \quad (5.1)$$

où :

$S_1(\tilde{\nu})$ est la radiance à la sortie de la cellule à gaz

$B(\tilde{\nu}, T)$	est la fonction de Planck à la température T du gaz dans la cellule
$T_r(\tilde{\nu}, P, T)$	est la transmission du gaz à la pression P et la température T du gaz dans la cellule
$\tilde{\nu}$	est le nombre d'onde courant

Dans ce cas on ne tient pas compte de l'influence de la cellule, en particulier des lames en ZnSe. On peut envisager plusieurs cas qui tiennent compte l'influence des lames sur la transmission de la cellule.

V.2.2 Prise en compte des lames en ZnSe dans les simulations

On envisage maintenant le cas on l'on tient compte des lames. On a une transmission pour le parcours : CNF + lame1 + gaz (CO/NH₃) + lame2 + IASI. Si la transmission « extrinsèque » des lames est prise en compte, mais si on suppose que les lames n'absorbent pas de rayonnement, on peut écrire :

$$S_2(\tilde{\nu}) = \{B(\tilde{\nu}, T_{fond}) T_{r1}(\tilde{\nu}) T_r(\tilde{\nu}, P, T) + B(\tilde{\nu}, T)[1 - T_r(\tilde{\nu}, P, T)]\} T_{r2}(\tilde{\nu}) \quad (5.2)$$

On utilise :

L'indice 1 pour la lame ZnSe du coté corps noir froid et

L'indice 2 pour la lame ZnSe du coté instrument IASI

Dans l'équation (5.2),

T_{r1} représente la transmission lame 1 et

T_{r2} représente la transmission lame 2

Il existe un autre effet qui pourrait être pris en compte. Il s'agit du flux venant de la cavité instrument et se réfléchissant sur la lame, du coté de l'instrument, dans ce cas on a :

CNF + lame1 + gaz (CO/NH₃) + lame2 + rétro-réflexion cavité IASI + IASI, la radiance arrivant sur le détecteur a pour expression :

$$S_3(\tilde{\nu}) = S_2(\tilde{\nu}) + S_{IASI}(\tilde{\nu}) \quad (5.3)$$

avec :

$$S_{IASI}(\tilde{\nu}) = B(\tilde{\nu}, T_{IASI}) R_2(\tilde{\nu})$$

et où $R_2(\tilde{\nu}) = 1 - T_{r2}(\tilde{\nu})$ est le coefficient de réflexion "extrinsèque" de la lame 2.

T_{IASI} est une température effective de cavité équivalente. On peut éventuellement multiplier par une émissivité effective dépendant de $\tilde{\nu}$, si on ne peut pas représenter ce flux venant de l'instrument IASI par un corps noir. On peut se poser la question de savoir si le flux parasite $S_{IASI}(\tilde{\nu})$ ne doit pas être considéré un cran plus loin, c'est à dire : traverser la lame 2, traverser le gaz vers la lame 1, se réfléchir sur la lame 1, re-traverser le gaz, et re-traverser la lame 2, soit une contribution supplémentaire:

$$\Delta S(\tilde{\nu}) = B(\tilde{\nu}, T_{IASI}) T_{r2}(\tilde{\nu}) T_r(\tilde{\nu}, P, T) R_1(\tilde{\nu}) T_r(\tilde{\nu}, P, T) T_{r2}(\tilde{\nu}) \quad (5.4)$$

et donc le flux réel à l'entrée de l'instrument serait:

$$S_4(\tilde{\nu}) = S_3(\tilde{\nu}) + \Delta S(\tilde{\nu}) \quad (5.5)$$

On a introduit le coefficient de réflexion "extrinsèque" de la lame 1:

$$R_1(\tilde{\nu}) = 1 - T_{r1}(\tilde{\nu}) \quad (5.6)$$

Avant d'aller plus loin et de prendre en considération le cas où les lames absorbent une partie du rayonnement, nous allons revenir sur le coefficient extrinsèque. Celui-ci intervient dans les processus de transmission/réflexion à travers une lame.

Pour une lame non absorbante, les coefficients de réflexion/transmission viennent du changement d'indice. Pour un matériau d'indice n (en principe $n(\tilde{\nu})$), les coefficients de réflexion/transmission pour une seule interface s'écrivent en fonction de n comme:

$$r_1 = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \quad (5.7)$$

$$t_1 = \frac{4n}{(n+1)^2} \quad (5.8)$$

L'indice 1 montre qu'on n'a qu'une surface (ou dioptré) et on vérifie bien que : $r_1 + t_1 = 1$. C'est-à-dire que l'interface n'absorbe pas ce qui est le cas de certaines surfaces multicouches.

Les deux formules sont invariantes quand on change n en $1/n$ (dioptré vide/ZnSe ou ZnSe/vide à cause du retour inverse). Si on tient compte des réflexions multiples dans une lame, mais sans supposer d'interférences, on doit modifier ces coefficients qui deviennent pour une lame unique:

$$r = \frac{2r_1}{1+r_1} = \frac{(n-1)^2}{1+n^2} \quad (5.9)$$

$$t = \frac{t_1}{1+r_1} = \frac{2n}{1+n^2} \quad (5.10)$$

On trouve toujours que : $r + t = 1$, car on a supposé la lame non absorbante. On peut faire l'application numérique pour le ZnSe pour lequel $n(IR) = 2,4$, mais avec une légère dépendance spectrale (à introduire pour des calculs de haute précision).

On trouve:

$$r_1 = 0,17 \text{ et } r = 0,29 \quad (5.11)$$

$$t_1 = 0,83 \text{ et } t = 0,71 \quad (5.12)$$

Les coefficients $T_{r1}(\tilde{\nu})$ et $T_{r2}(\tilde{\nu})$ introduits plus haut sont tels que

$$T_{r1}(\tilde{\nu}) = T_{r2}(\tilde{\nu}) = t \quad (5.13)$$

On suppose ici qu'ils sont faiblement dépendant de $\tilde{\nu}$. Mais on pourrait calculer $t(\tilde{\nu})$ précisément si on avait une table de $n(\tilde{\nu})$ pour ZnSe entre 600 et 3000 cm^{-1} .

Les lames n'étant pas traitées anti-reflet T_{r1} et T_{r2} peuvent avoir un effet non négligeable sur la transmission, tout dépend de la précision que l'on recherche.

V.2.3 Modélisation dans le cas de lames absorbantes

On introduit maintenant le fait que les lames absorbent une partie du rayonnement qui les traverse. Cela nous amène à introduire le coefficient intrinsèque de ZnSe. Pour le ZnSe on a un coefficient d'absorption « intrinsèque » k_i valant $5,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ et les lames ont une épaisseur $L = 1,5 \text{ cm}$ soit une épaisseur optique de chaque lame i : $\tau_i = k_i \cdot L = 7,5 \cdot 10^{-4}$

On pourrait dire que c'est suffisamment faible pour être négligé. Si on ne le fait pas, la transmission intrinsèque de la lame s'écrit:

$$t_i = \exp(-\tau_i) \quad (5.14)$$

Cette transmission (notée ici t_i pour simplifier) apparaîtra plus loin sous la forme de $T_{r_i}(1, T_1)$ et $T_{r_i}(2, T_2)$ lorsqu'on a 2 lames à considérer et avec T_1 et T_2 les températures respectives des lames 1 et 2. Si on tient compte de t_i , les valeurs de r et t doivent être modifiées et deviennent alors des grandeurs « globales », c'est-à-dire de type « extrinsèque » + « intrinsèque » et s'écrivent:

$$r' = r_1 + \frac{r_1 t_1^2 t_i^2}{1 - r_1^2 t_i^2} \quad (5.15)$$

$$t' = t_1^2 \frac{t_i}{1 - r_1^2 t_i^2} \quad (5.16)$$

On a toujours $t_l = r_l - 1$

mais on a gardé les 2 symboles pour simplifier. On aurait pu tout exprimer en fonction de r_l uniquement:

$$r' = r_1 \frac{1 + t_i^2 (1 - 2r_1)}{1 - r_1^2 t_i^2} \quad (5.17)$$

$$t' = \frac{(1 - r_1)^2 t_i}{1 - r_1^2 t_i^2} \quad (5.18)$$

Dans ce cas on n'a plus dans ce cas: $r' + t' = 1$, car il y a de l'absorption dans la lame (photons non réfléchis ni transmis) et on doit donc écrire:

$$r' + t' + a' = 1 \quad (5.19)$$

où a' est la fraction d'énergie absorbée par la lame. On trouve l'expression complète de a' sous la forme:

$$a' = (1 - r_1) \frac{(1 - t_i)}{1 - r_1 t_i} \quad (5.20)$$

Dans le cas qui nous intéresse l'absorption est faible, mais attention, si on descend en dessous de 600 cm^{-1} , ce n'est plus le cas et on doit donc toujours se souvenir de la dépendance spectrale (en nombre d'onde $\tilde{\nu}$) de tous les coefficients. On peut donc essayer de faire un développement limité en τ_i au 2^{ème} ordre. τ_i dépend clairement de l'épaisseur de la lame et

donc r' et t' en dépendent aussi, alors que l'épaisseur de la lame n'intervenait pas dans l'expression de r et t . On trouve donc au 2^{ème} ordre en τ_i :

$$r' = r - \tau_i a_1 r_i + \tau_i^2 a_2 r_i + \dots \quad (5.21)$$

$$t' = t - \tau_i a_1 t_i + \tau_i^2 a_2 t_i + \dots \quad (5.22)$$

$$a' = \tau_i a_1 a_i + \tau_i^2 a_2 a_i + \dots \quad (5.23)$$

r et t gardent leurs expressions données plus haut pour les coefficients « extrinsèques » d'une lame non absorbante. Le coefficient a' traduit l'absorption de la lame (quantifiée par l'intermédiaire de τ_i) et ce même facteur τ_i modifie aussi l'expression des coefficients de réflexion et de transmission maintenant globaux de la lame absorbante. Ils dépendent désormais de l'épaisseur de la lame. Les différents paramètres et coefficients sont rappelés ci-dessous (pour être complet):

$$r = \frac{2r_1}{1+r_1} \qquad t = \frac{1-r_1}{1+r_1} \quad (5.24)$$

$$a_1 r_i = \frac{2r_1}{(1+r_1)^2} \qquad a_1 t_i = \frac{1+r_1^2}{(1+r_1)^2} \quad (5.25)$$

$$a_2 r_i = 2r_1 \frac{1+r_1^2}{2(1-r_1)(1+r_1)^3} \qquad a_2 t_i = \frac{1+6r_1^2+r_1^4}{2(1-r_1)(1+r_1)^3} \quad (5.26)$$

$$a_1 a_i = 1 \qquad a_2 a_i = \frac{1+r_1}{2(1-r_1)} \quad (5.27)$$

On a fait des développements limités et on a divisé par $1-r_1$ qui apparaît donc au dénominateur. Les formules ne s'appliquent donc pas dans le cas d'une lame très réfléchissante ($r_1 \sim 1$), mais dans ce cas sa transmission intrinsèque importe peu (en principe). Si ce n'était pas le cas [pour ceux qui s'intéressent à ce problème dans un autre contexte], il faudrait revenir aux formules complètes de r' et t' . La cohérence des calculs, est vérifiée c'est-à-dire $r' + t' + a' = 1$, car on a bien:

$$a_1 r_i + a_1 t_i = a_1 a_i = 1 \quad (5.28)$$

$$a_2 r_i + a_2 t_i = a_2 a_i \quad (5.29)$$

Clairement dans le cas des lames de ZnSe de la cellule à gaz IASI on pourra faire (pour une lame et parce que τ_i est petit):

$$r' = r = \frac{(n-1)^2}{1+n^2} \quad (5.30)$$

$$t' = t = \frac{2n}{n^2+1} = T_{r1}(\tilde{\nu}) = T_{r2}(\tilde{\nu}) \quad (5.31)$$

$$a' = \tau_i \quad (5.32)$$

Dans le cas donc où les lames absorbent on doit donc considérer le système :

CNF + lame1 absorbante + gaz (CO/NH₃) + lame2 absorbante + IASI

Même si le coefficient d'absorption « intrinsèque » des lames de ZnSe est faible, on pourrait être amené à le considérer et à introduire l'émission correspondante si on connaît les températures des lames (qui peuvent être différentes vu que la lame 1 est très proche du CN froid). On est donc amené à introduire les notations supplémentaires suivantes:

$T_{ri}(1, T_1)$ = transmission « intrinsèque » de la lame 1 à la température T_1

$T_{ri}(2, T_2)$ = transmission « intrinsèque » de la lame 2 à la température T_2

On doit alors en théorie:

- modifier le coefficient de réflexion « extrinsèque » des lames
- modifier le coefficient de transmission « extrinsèque » des lames
- tenir compte de l'émission thermique des lames.

Cela peut vite se compliquer, car on a toujours le problème des réflexions multiples sur les différentes lames (même si on modélise une lame par une lame idéale non absorbante d'épaisseur nulle et une lame absorbant/émettant mais non réfléchissante).

On pourra écrire le flux émis par le CNF, traversant la 1^{ère} lame, auquel s'ajoute la contribution de la lame 1 en émission, traversant le gaz, traversant la 2^{ème} lame et auquel s'ajoute la contribution de la lame 2 en émission de la façon suivante:

$$S_a(\tilde{\nu}) = B(\tilde{\nu}, T_{fond})T_{r1}(\tilde{\nu}) + B(\tilde{\nu}, T_1)[1 - T_{r1}(1, T_1)] \quad (5.33)$$

$$S_b(\tilde{\nu}) = S_a(\tilde{\nu})T_r(\tilde{\nu}, P, T) + B(\tilde{\nu}, T)[1 - T_r(\tilde{\nu}, P, T)] \quad (5.34)$$

$$S_c(\tilde{\nu}) = S_b(\tilde{\nu})T_{r2}(\tilde{\nu}) + B(\tilde{\nu}, T_2)[1 - T_{r2}(\tilde{\nu})] \quad (5.35)$$

où a , b , c sont les interfaces suivantes en allant du CNF vers IASI:

a juste après la lame 1

b juste avant la lame 2

c juste après la lame 2

On peut faire les approximations:

$$1 - T_{ri}(1, T_1) = \tau_1 \quad (5.36)$$

$$1 - T_{ri}(1, T_2) = \tau_2 \quad (5.37)$$

et les lames étant identiques (même épaisseur $L = 1,5$ cm):

$$\tau_1 = \tau_2 = \tau_i \text{ (relativement indépendant de } T)$$

La valeur correspondante a été donnée plus haut, c'est-à-dire $\tau_i = 7,5 \cdot 10^{-4}$. Reste à faire les simulations numériques. Nous n'avons pas effectué les simulations qui tiennent compte de la cellule mais nous estimons que ce modèle permettra de faire le lien entre les spectres simulés (*Fig. V.9 et V.10*) en ne considérant que le gaz et les spectres (*Fig. V.11*) qui ont été effectivement enregistrés à l'ESTEC lors des essais en vide thermique des différents instruments sur la plate-forme MetOp. Les mesures IASI avec la cellule à gaz montrent clairement qu'on pourra faire une analyse détaillée de la réponse spectrale de l'instrument sur tout le domaine. La forme observée montre aussi qu'on devra modéliser le fond continu avec la transmission des lames et la contribution de la cavité IASI elle-même. Notre étude a préparé ce travail d'interprétation.

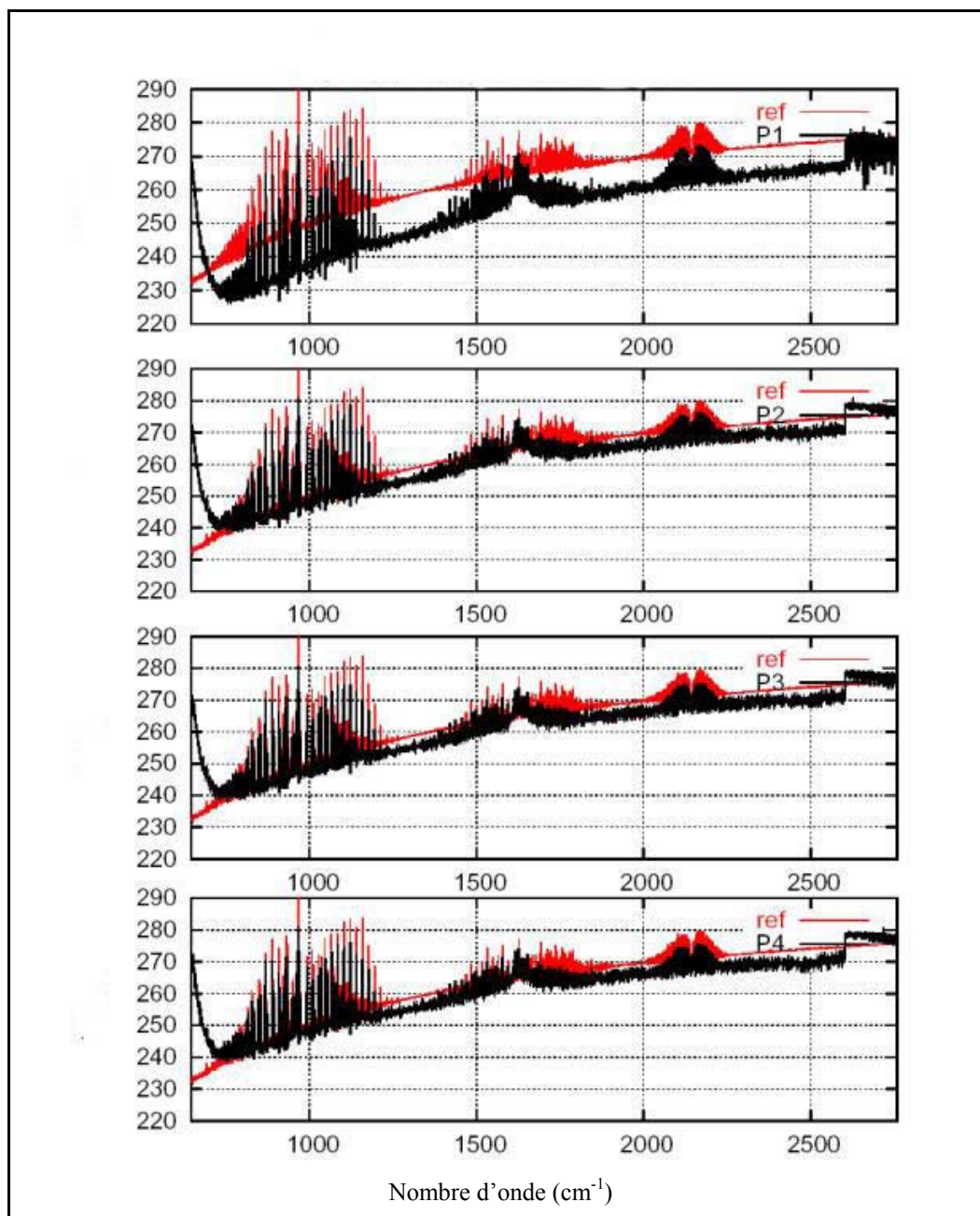


Figure V.11 : Spectres en température de brillance obtenus avec la cellule à gaz IASI et enregistrés pour chacun des pixels (P1 à P4) de l'instrument.

V.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la faisabilité et la modélisation d'une cellule à gaz contenant un mélange de NH₃/CO dans le but d'analyser les spectres enregistrés par l'instrument IASI en visant un gaz dont la nature et les conditions de température et de pression sont connues. La cuve permet l'étude de la réponse spectrale de l'instrument et doit

conduire à la caractérisation de la fonction d'appareil pour les différents pixels de IASI sur la plate forme MetOp.

Un mélange équimolaire de CO et NH₃ avec une pression totale au sein de la cellule de 10 hPa permet de couvrir les 3 bandes spectrales de l'instrument avec un rapport supérieur à 10 entre les raies les plus intenses et le bruit instrumental. Les spectres simulés montrent que des raies fines et assez espacées pourront être utilisées pour l'analyse des spectres enregistrés lors des essais.

Au vu des simulations du LPMA, le CNES a demandé au LPMA de réaliser deux cellules contenant un mélange CO/NH₃. Elles ont effectivement été fabriquées par l'atelier de mécanique (conception : J. Ménard, réalisation : G. Lerille et D. Mayèle) et équipées de lames de ZnSe. Une cellule a été livrée par le LPMA au sous-traitement du CNES, c'est Alcatel qui l'a testée et qualifiée pour être utilisée en salle blanche de qualité spatiale. La cellule a été utilisée avec succès lors des essais en vide thermique à l'ESTEC de l'instrument IASI sur la plate-forme MetOp. Afin de reproduire le signal qui arrive sur les détecteurs IASI, il faut prendre en considération les effets de la cuve et notamment les effets apportés par les lames en ZnSe. Notre modèle a envisagé le cas où les lames absorbaient une partie du rayonnement et celui où le rayonnement était en partie réfléchi à l'intérieur de la cellule. Les simulations effectives n'ont pas été effectuées par le LPMA, mais la modélisation des spectres enregistrés lors des essais est basée sur notre travail préliminaire et sera réalisée par la société NOVELTIS, qui est en charge des simulations et du traitement des spectres de cuve en utilisant l'algorithme 4A (Automatized Atmospheric Absorption Atlas), qui est l'algorithme opérationnel de l'instrument IASI.

CONCLUSION

Au cours de ce travail de thèse, nous avons effectué l'inversion des spectres en émission dans l'infrarouge thermique enregistrés lors du second vol (IASI02) de l'instrument IASI-ballon. En inversant les profils et les colonnes totales de l'ozone (O_3), du protoxyde d'azote (N_2O), du méthane (CH_4) et du monoxyde de carbone (CO) nous avons testé la capacité de notre code de transfert radiatif à reproduire dans des conditions réelles les spectres atmosphériques en tenant compte de la contribution raie par raie des différentes espèces qui participent à l'émission ou à l'absorption du rayonnement infrarouge entre la surface et le point d'observation (ballon ou satellite) pour une atmosphère dont les profils de pression et de température sont supposés connus. L'emploi systématique des fonctions de poids et des noyaux moyens permet de préciser la sensibilité des différentes raies des différentes espèces dans les fenêtres spectrales inversées tout en fournissant une indication sur l'information qu'on peut obtenir sur le profil vertical des différentes espèces. Cela a permis d'envisager, selon qu'on dispose d'une ou plusieurs informations indépendantes sur le profil, l'inversion d'un profil dans le cas de O_3 et d'une colonne totale pour N_2O , CH_4 et CO . Le travail qui a été effectué en

comparant les inversions des spectres IASI-ballon et celles réalisées sur des spectres dégradés à la résolution de IASI/MetOp montre l'influence de la résolution spectrale sur la capacité de l'algorithme à restituer le profil d'ozone et la colonne totale de N₂O, CH₄ et CO. On constate que les colonnes obtenues lors des inversions des spectres « IASI-like » sont légèrement sous-estimées pour N₂O dans les deux fenêtres étudiées. Le même phénomène est observé pour les colonnes de CO. Il semble que cela soit lié à un effet de brouillage des raies lorsque la résolution spectrale devient insuffisante. Mais les résultats obtenus avec les spectres « IASI-like » en prenant comme référence les résultats des inversions des spectres IASI02 correspondent à ce qu'on attend de l'inversion des spectres de l'instrument spatial IASI.

En passant de la résolution spectrale de IASI-ballon à celle de IASI/MetOp, on constate une évolution des noyaux moyens et le nombre de degrés de liberté (que l'on détermine avec la trace de la matrice des noyaux moyens) diminue. Mais, selon la résolution spectrale, on observe une cohérence dans l'évolution de la forme des noyaux moyens et l'information indépendante dans les profils reste localisée à des niveaux d'altitude comparables.

Dans le cas de l'ozone un changement de base spectroscopique n'apporte pas de différences notables au niveau de la distribution verticale de l'information comme le montrent les noyaux moyens. Cependant nous avons montré que les différences entre la base spectroscopique de HITRAN 2000 et celle de MIPAS ont un impact significatif sur la simulation des spectres atmosphériques. Même si pour l'ozone la base MIPAS améliore les résidus entre les spectres calculés et les spectres observés dans la fenêtre entre 950 et 1100 cm⁻¹, il subsiste toujours un résidu corrélé à la distribution de l'intensité moyenne des raies dans la bande d'ozone. L'hypothèse d'un « line-mixing » pour l'ozone pourrait être une des explications à ce phénomène. À fin de vérifier cette hypothèse l'amélioration des bases spectroscopiques par des travaux de laboratoire reste nécessaire. Pour l'ozone, l'inversion des profils a été possible avec deux niveaux de restitution situés dans la tropopause (6 km) et la basse stratosphère (19 km). Il sera intéressant d'effectuer à nouveau cette étude, lors du traitement des spectres qui seront acquis lors de la prochaine campagne ballon qui aura lieu courant 2005 dans une région tropicale à Teresina (Brésil) et de suivre l'évolution de la structure des noyaux moyens en fonction de la latitude (de l'Arctique à l'équateur).

L'introduction de l'entropie informationnelle calculée de manière spectrale semble un bon outil pour le choix des fenêtres ou micro-fenêtres spectrales. L'étude faite sur l'ozone montre que l'entropie informationnelle contenue dans un spectre se répartit de manière différente en fonction de l'altitude. Ce genre d'étude doit se poursuivre sur les autres espèces chimiques et sur d'autres spectres (qu'ils proviennent de IASI-ballon ou d'instruments

spatiaux). L'outil mis en place facilite la détermination des micro-fenêtres les plus intéressantes pour l'inversion, en particulier pour les algorithmes opérationnels de IASI, mais aussi pour d'autres projets satellitaires comme TROC (TROpospheric Chemistry and climate) récemment soumis à l'ASE et dont l'objectif est de fournir des mesures pour la chimie troposphérique globale et la pollution à l'échelle régionale.

La mise en place de l'exercice d'intercomparaison de code de calcul raie par raie (LIE) a souligné les points qui peuvent introduire des différences dans le calcul de transfert radiatif. Le futur traitement des simulations des spectres et la comparaison des codes de calcul mettra en évidence les points qui peuvent être améliorés et ceux qui exigeront de nouveaux travaux de spectroscopie ou de modélisation.

Avec le second vol de l'instrument IASI-ballon, en plus des spectres en visée au nadir que nous avons analysé en détail et dont les résultats ont été présentés dans ce travail nous disposons de spectres infrarouges en émission thermique dans une géométrie de visée au limbe qui n'ont pas encore traités. Du fait de la géométrie et de la nature des spectres, leur traitement impose une modification de notre algorithme d'inversion. D'un point de vue scientifique, le traitement de ces spectres et notamment l'inversion de l'ozone à partir des spectres au limbe apportera sans doute des informations complémentaires sur la question de la forme du résidu, si le problème n'est pas dû par exemple à un effet de « line-mixing » mais plutôt à un problème de résolution verticale.








En associant les images infrarouges prises durant le vol aux spectres IR en visée au nadir que nous avons étudiés pour les pixels clairs, il est possible de déterminer l'altitude supérieure des nuages et par conséquent il est envisageable d'exploiter les spectres dans les cas nuageux. Une connaissance de la structure des nuages ainsi que de leurs propriétés optiques fait encore défaut, mais il est possible de traiter ces spectres en couplant l'information qu'ils contiennent avec celle provenant des images IR.

Dans le cadre de la qualification de l'instrument IASI, notre étude et la réalisation effective de la cellule à gaz (NH_3/CO) ont montré que le LPMA a su tenir ses engagements vis à vis du CNES en fournissant un dispositif de test et de caractérisation de « qualité spatiale » qui a permis de tester la réponse spectrale de l'instrument IASI. Les spectres de cuve enregistrés à l'ESTEC lors des essais en vide thermiques des différents instruments installés sur la plate-forme MetOp sont de qualité tout à fait intéressante pour tester en détail les algorithmes de calibration de spectrale et de détermination de la fonction d'appareil (ISRF). La prise en compte des fenêtres en Zn/Se semble nécessaire pour la simulation détaillée des spectres. Ce travail sera réalisé par la société NOVELTIS pour le CNES, mais il sera

intéressant d'effectuer au LPMA un travail parallèle avec les outils mis en place (algorithme scientifique LARA, modèle de la transmission de la cellule,...) pour faire des comparaisons avec algorithme opérationnel 4A qui est utilisé et maintenu par NOVELTIS.

BIBLIOGRAPHIE
















La bibliographie est classée suivant l'ordre alphabétique du premier auteur et l'année de publication.















- [AMA82] Amat G., Spectroscopie des constituants atmosphériques, In physique moléculaire – physique de l'atmosphère, Editions C.N.R.S., Paris, (1982). 
- [ANC97] Ancellet G., Beekmann M., Evidence for changes in the ozone concentration in the free troposphere over southern France from 1976-1995, Atmos. Environ. 31 (1997) pp. 2835-2851. 
- [AND86] Anderson G. P., Clough S.A., Kneizys F.X., Chetwynd J.H., Shettle E.P., AFGL atmospheric constituent profiles (0-120 km), tech. Rep. AFGL-TR-86-0110, Phillips Lab., Hanscom Air Force Base, Mass., (1986). 
- [ARMA92] Armante R., Inversion des spectres enregistrés par occultation solaire dans l'infrarouge à partir de ballon ou de satellite en vue de déterminer les profils verticaux de concentration des constituants de l'atmosphère terrestre, Thèse de l'Université de Pierre et Marie Curie, Paris VI, (1992). 
- [ARM82] Armstrong R.L., Line mixing in the ν_2 band of CO₂, Applied Optics, Vol. 21, Issue 12, (1982), pp. 2141-2145. 
- [BAR78] Barhost A.J., Roos J.P., Solution of non-linear least squares problems: numerical results with Marquardt type algorithms, Comp. Stat., (1978), pp. 37-47. 
- [BLO94] Blom C.E., Fischer H., Glatthor N., Gulde T., Höpfner M., Airborne measurements during the European Arctic Stratospheric Ozone Experiment: column amounts of HNO₃ and O₃ derived from FTIR emission sounding, Geophys. Res. Lett., 21, (1994), pp. 1351–1354. 

- [BÖC99] Böckle S., Einecke S., Hildenbrand F., Orlemann C., Schulz C., Wolfrum J., Laser-spectroscopic investigation of OH-radical concentration in the exhaust plane of the jet engine, *Geophys. Res. Lett.* 26 (1999) pp. 1849-1852. [📖](#)
- [BOR86] Borysow A., Frommhold L., Collision-induced rototranslational absorption spectra of N₂-N₂ pairs for temperatures from 50 to 300 K, *The Astrophysical Journal*, 311, (1986) pp. 1043-1057. [📖](#)
- [BRA82] Brasseur G.P., *Physique et Chimie de l'atmosphère moyenne*, Paris New York, Masson, (1982). [📖](#)
- [BRO92] Brown L.R., Farmer C.B., Rinsland C.P., Zander R., Remote sensing of the atmosphere by high resolution infrared absorption spectroscopy. *Spectroscopy of the Earth's atmosphere and interstellar medium*, ed. K. Narahari Roa and A. Weber, Academic Press (1992).
- [CAM96] Camy-Peyret C., Bergqvist B., Galle B., Carleer M., Clerbaux C., Colin R., Fayt C., Goutail F., Nunes-Pinharanda M., Pomereau J.P., Haussmann M., Platt U., Pundt I., Rudolph T., Hermans C., Simon P.C., Vandaele A.C., Plane J.C., Smith N., Intercomparison of instruments for tropospheric measurements using differential optical absorption spectroscopy, *J. Atmos. Chem.* 23 (1996) pp. 51-80. [📖](#)
- [CAM01] Camy-peyret C., Payan S., Jeseck P., Té Y., Mesures spectroscopiques des constituants et polluants atmosphériques par techniques *in situ* et à distance, au sol ou embarquées, *C.R. Acad. Sci. Paris, série IV*, t.2, (2001) pp. 905-922. [📖](#)
- [CAM04] Camy-Peyret C., S. Payan S., Dufour G., Oelhaf H., Wetzel G., Stiller G., Glatthor N., Blumenstock Th., Blom C.E., Keim C., Mikuteit S., Engel A., Pirre M., Moreau G., Catoire V., Bracher A., Weber M. & Bramstedt K., Validation of MIPAS CH₄ profiles by stratospheric balloon, aircraft and ground based measurements, *Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2)*, 3-7 May 2004, ESA-ESRIN, Frascati, Italy, ESA SP-562, (2004).
- [CAR92] Carli B., Carlotti M., Far-infrared and microwave spectroscopy of the Earth's atmosphere, in: Narahari Roa K., Weber A. (Eds.), *Spectroscopy of the Earth's atmosphere and Interstellar Medium*, Academic Press, 1992. [📖](#)
- [CHAN77] Chang Y.S., Shan J.H., A non-linear least squares method of determining line intensities and half-widths. *Applied Spectroscopy*, 31, n° 3, (1977), pp. 213-219. [📖](#)
- [CHA31] Chapman S., The absorption and dissociative or ionizing effect of monochromatic radiation in an atmosphere on a rotating earth. Part II: grazing incidence, *Proc. Phys. Soc.* 43, (1931) pp. 483-501. [📖](#)
- [CHA61] Chapman S. Scale times lengths of variables with geomagnetic and ionospheric illustrations, *Proc. Phys. Soc.*, 77 (1961) pp 483-501. [📖](#)
- [CHAV88] Chavent G., On uniqueness of local minima for general abstract non-linear least squares problems, *Inverse problems*, 4, (1988), pp. 417-433. [📖](#)
- [CHO99] Cho J.Y.N., Newell R.E., Thouret V., Marengo A., Smit H., Trace gas study accumulates forty million frequent-flyer miles for science, *EOS* 80, (1999), pp. 377-384. [📖](#)
- [CLA00] von Clarmann T., Dudhia A., Echle G., Funke B., Glatthor N., Hase F., Höphner M., Kellmann S., Kemnitzer H., Kuntz M., Linden A., Linder M., Stiller G.P., Zorn S., The Karlsruhe optimizer and precise radiative transfer algorithm (KOPRA). Technical Report *Wissenschaftliche Berichte*, Bericht n° 6487, Forschungszentrum Karlsruhe, (2000). [📖](#)


- [CLE99] Clerbaux C., Hadji-Lazaro J., Payan S., Camy-peyret C., Mégie G., retrieval of CO from the IMG/ADEOS spectra. *IEEE transaction on geoscience and remote sensing*, 37, 3, (1999), pp. 1657 – 1662. [📖](#)
- [CLE03] Clerbaux C., Coheur P.-F., Turquety S., Hadji-Lazaro, Capabilities of infrared sounder observation for monitoring atmospheric composition and chemistry applications, *Raport For Eumesat*, (2003). [📖](#)
- [CLO89] Clough S.A., Kneizys F.X., Davies R.W., Line shape and water vapor continuum, *Atmos. Res.*, 23, issue 3-4, (1989), pp. 229-241. [📖](#)
- [CLO92] Clough S.A., Iacono M.J., Moncet J-L., Line-by-line calculation of atmospheric fluxes and cooling rates, 1, Application to water vapor, *J. Geophys. Res.*, 97, (1992), pp. 761-785. [📖](#)
- [CLO95] Clough S.A., Rinsland C.P., Brown P.D., Retrieval of tropospheric ozone from simulations of nadir spectral radiances as observed from space, *J. Geophys. Res.*, 100, n°D8, (1995), pp. 16579-16593. [📖](#)
- [CRU70] Crutzen P.J., The influence of nitrogen oxides on atmospheric ozone content. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 96, (1970), pp. 320-325. [📖](#)
- [DUF04] Dufour G., Payan S., Té Y., Jeseck P., Ferreira V., Camy-Peyret C., Eremenko M., Butz A., Pfeilsticker K., Gurlit W., Gerilowski K., ENVISAT validation results obtained with LPMA and IASI-balloon FTIR, *Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2)*, 3-7 May 2004, ESA-ESRIN, Frascati, Italy, ESA SP-562, (2004). [📖](#)
- [DUR99] During G., Mégie G., Atmospheric CH₄ and H₂O monitoring with near-infrared InGaAs laser diodes by the SDLA, a balloon borne spectrometer for tropospheric and stratospheric in situ measurements, *App. Opt.*, 38, (1999), pp. 73442-7354. [📖](#)
- [EDW92] Edwards D.P., Genln2. a general line-by-line calculation of atmospheric transmittance and radiance model. *near tech. Note near/tn-367+str*, national Center for Atmospheric Research, Boulder, CO, (1992).
- [ENG00] Englert C.R., Schimpf B., Birk M., Schreier F., Krocka M., Nitsche R.G., Titz R.U., The 2.5 THz heterodyne spectrometer THOMAS: measurement of OH in the middle atmosphere and comparison with photochemical model results, *J. Geophys. Res.* 105 (2000) pp. 22211-22223. [📖](#)
- [ERE03] Eremenko M., Inversion des spectres infrarouges à haute résolution spectrale enregistrés en absorption à partir de ballons stratosphériques. Ajustement global de grands domaines spectraux, *Inversion multi-paramètres (espèces moléculaires)*, Thèse de l'Université de Pierre et Marie Curie, Paris VI, (2003). [📖](#)
- [FAH95] Fahey D.W., Keim E.R., Woodbridge E.L., Gao R.S., Boerin K.A., Daube B.C., Wofsy S.C., Lohmann R.P., Hints E.J., Dessler A.E., Webster C.R., May R.D., Brock C.A., Wilson J.C., Miake-Lye R.C., Brown R.C., Rodriguez J.M., Loewenstein M., Proffitt M.H., Stmpfle R.M., Bowen S.W., Chan K.R., In situ observation in aircraft exhaust plumes in the lower stratosphere at middle altitudes, *J. Geophys. Res.*, 100, (1995), pp. 3065-3074. [📖](#)
- [FIS96] Fischer H., Oelhaf H., Remote sensing of vertical profiles of atmospheric trace constituents with MIPAS limb mission spectrometers, *Appl. Opt.*, 35, (1996), pp. 2787–2796. [📖](#)
- [GIE99] Gierens K., Schumann U., Helten M., Marenco A., A distribution law for relative humidity in the upper troposphere and lower stratosphere derived from three years of MOZAIC measurements, *Ann. Geophysicae* 17 (1999), pp. 1218-1226. [📖](#)
- [GOD89] Godin S., Mégie G ; Pelon J., Systematic Lidar measurements of the Stratospheric ozone vertical distribution, *Geophys. Res. Lett.* 16 (1989) pp. 537-550. [📖](#)

- [**GOO00**] Goode J.G., Yokelson R.J., Ward D.E., Sucott R.A., Babbitt R.E., Davies M.A., Hao W.M., Measurement of excess O₃, CO₂, CO, CH₄, C₂H₄, C₂H₂, HCN, NO, NH₃, HCOOH, CH₃COOH, HCHO and CH₃OH in 1997 alaskan biomass burning plumes by airborne Fourier transform infrared spectroscopy (AFTIR), *J. Geophys. Res.*, 105, (2000), pp. 22147-22166. [📖](#)
- [**HAR98**] Harder H., Camy-Peyret C., Ferlemann F., Fitenberger R., Hawat T., Osterkamp H., Schneider M., Perner D., Platt U., Vradelis P., Pfeilsticker K., Stratospheric BrO profiles measured at different latitudes and season: Atmospheric observations, *Geophys. Res. Lett.* 25, n°20, (1998) pp. 3843-3846. [📖](#)
- [**HAS96**] Haschberger P., Lendermeir E., Spectrometric inflight measurement of aircraft exhaust emission: First results of the June 1995 campaign, *J. Geophys. Res.*, 101, (1995), pp. 25995-26006. [📖](#)
- [**HAU94**] Haus R., Schäfer K., Bautzer W., Heland J., Mosebach H., Bittner H., Eisenmann T., Mobile Fourier-transform infrared spectroscopy monitoring of air pollution, *Appl. Opt.*, 33, (1994), pp. 5682-5689. [📖](#)
- [**HER64**] Herriott D., Kogelnik H., Kompfner R., Off-axis paths in spherical mirror interferometers, *Appl. Opt.* 3, 523-526 (1964). [📖](#)
- [**HOF95**] Hoffmann D., Bonasoni P., De Mazière M., Evangelisti F., Giovanelli G., Goldman A., Goutail F., Harder J., Jakobek R., Johnston P., Kerr J., Matthews W.A., McElroy T., McKenzie R., Mount G., Platt U., Pommereau J.P., Sarkissian A., Simon P., Solomon S., Stutz J., Thomas A. Van Roozendaal M., Wu E., Intercomparison of UV/visible spectrometers for measurements of stratospheric NO₂ for the network for the detection of stratospheric change, *Geophys. Res.* 100 (1995) pp. 16765-16791. [📖](#)
- [**HOL95**] Holton J.R., Haynes P.H., McIntyre, Douglass A.R., Rood R.B., Pfister L., Stratosphere-troposphere exchange, *Rev. Geophys.*, 33, (1995) pp. 403. [📖](#)
- [**IPC01**] IPCC, Climate change 2001: The Scientific Basis. Contribution of working group I to the third assessment report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, Cambridge Univ. Press. , UK, (2001). [📖](#)
- [**JOH95**] Johnson D.G., Jucks R.W., Traub W.A., Chance K.V., Smithsonian stratospheric far-infrared spectrometer and data reduction system, *J Geophys. Res.* 100 (1995) pp. 3091-3106. [📖](#)
- [**JAC99**] Jacquinet-Husson N., Arié E., Ballard J., Barbe A., Bjoraker G., Bonnet B., Brown L.R., Camy-Peyret C., Champion J.P., Chedin A., Chursin A., Clerbaux C., Duxbury G., Flaud J.-M., Fourrie N., Fayt A., Graner G., Gamache R., Goldman A., Golovko V.I., Guelachvili G., Hartmann J.-M., Hilico J.C., Hillman J., Lefèvre G., Lellouch E., Miklailenko S.N., Naumenko O.V., Mentchinov, Newnham D.A., Nikitin A., Orphal J., Perrin A., Reuter D.C., Rinsland C.P., Rosenmann L., Rothman L.S., Scott N.A., Selby J., Sinitsa L.N., Sirota J.M., Smith A.M., Smith K.M., Tyuterev V.I.G., Tipping R.H., Urban S., Varanasi P., Weber M., The 1997 spectroscopic GEISA databank, *J. of Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.*, 62, (1999) pp. 205-254. [📖](#)
- [**KOI95**] Koide M., Taguchi M., Fukunishi H., Ground-based remote sensing of methane height profiles with a tunable diode laser heterodyne spectrometer, *Geophys. Res. Lett.* 22 (1995) 401-404. [📖](#)
- [**KRA00**] Krankowsky D., Lämmerzahl P., Mauerberger K., Isotopic measurements of stratospheric ozone, *Geophys. Res. Lett.*, 27, (2000) pp. 2593-2595. [📖](#)
- [**KUN99**] Kuntz M., Kopp G., Berg, H., Hoshchild G., Krupa R., Joint retrieval of atmospheric constituent profiles from ground-based millimeterwave measurements: ClO, HNO₃, N₂O and O₃, *J. Geophys. Res.*, 104, (1999), pp. 13981-13992. [📖](#)

- [LAM88] Lamoulie A., Cartographie de flammes par deux techniques optiques : imagerie spectrale multiplex et spectroscopie par diode laser. Thèse de l'université Pierre et Marie Curie, Paris VI, (1988). 
- [LEF76] Lefèvre F., Introduction aux analyses multidimensionnelles, Masson, Paris, (1976). 
- [LIN63] Linnik Y.V., Méthode des moindres carrées, Eléments de la théorie du traitement statistique des observations, Dunond, Paris, (1963). 
- [MÜL84] Müller C., Calculs du profil de Voigt appliqués aux raies infrarouges de la stratosphère et de la mésosphère, Académie royal de Belgique, Bulletin de la classe des sciences, 5^{ème} série, LXX, (1984). 
- [MLA99] Mlawer E.J., Tobin D.C., Clough S.A., Brown P.D., 9th ARM Science Team Meeting, (1999). 
- [MOU98] Mouvier G., La Pollution Atmosphérique, collection Dominos Flammarion n°34, Flammarion (1998).
- [MOR97] Moreau G., Camy-Peyret C., Robert C., Retailleau F., Letenneur B., Chartier M., Lemaire T., Pomathiod L., Rosier B., Louvet Y., Ramaroson R., A new balloon-borne instrument for *in situ* measurements of stratospheric trace species using infrared laser diodes, Proceedings 13th ESA Symposium on European Rocket Balloon Programmes and Related Research, Öland, Sweden, 26-29 may 1997, ESA SP-397, (1997), pp. 421-426. 
- [NAK95] Nakazawa T., Machida T., Sugawara S., Murayama S., Morimoto S., Hashida G., Measurements of the stratospheric carbon dioxide concentration over Japan using a Balloon-borne cryogenic sampler, Geophys. Res. Lett., 22, (1995), pp. 1229-1232. 
- [OPP98] Oppenheimer C., Spectroscopic observation of HCl degassing from Soufriere Hills volcano, Montserrat, Geophys. Res. Lett., 25, (1998) pp. 3681-3684. 
- [PAT00] Patra P.K., Lal S., Sheel V., Subbaraya B.H. Brühl C., Borchers R., Fabian P; Chlorine partitioning in the stratosphere based on *in situ* measurements, Tellus 52B, (2000), pp. 934-946. 
- [PAY96] Payan S., Restitution de profils verticaux de concentration des constituants minoritaires de la stratosphère à partir de spectres infrarouges à hautes résolution enregistrés sous ballon, Thèse de l'Université de Pierre et Marie Curie, Paris VI, (1996). 
- [PIE01] Pieroni D., Hartmann J.M., Camy-Peyret C., Jeseck P., Payan S., Influence of line mixing on absorption by CH₄ in atmospheric balloon-borne spectra near 3.3µm, J. of Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer., 68, (2001), pp. 117-133. 
- [PRE92] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P., Numerical Recipes in fortran (second edition), Cambridge University Press, Cambridge, (1992), <http://www.library.cornell.edu/nr/bookpdf.html>
- [RAL78] Ralston M.L., Jebbrich R.I., Dud, a derivative-free algorithm for non linear least squares, Technometrics, 20, n°1, (1978) 
- [REI75] Reiter E.R., Bauer E., Coroniti S.C., CIAP monograph, 1, ch. 2, Department of transportation, Washington, D.C. 20590, (1975). 
- [REN96] Renard J.-B., Pirre M., Robert C., Moreau G., Huguenin D., Russell III J.M., Nocturnal vertical distribution of stratospheric O₃, N₂O and NO₃ from balloon measurements, J. Geophys. Res., 101, (1996), pp. 28793-28804. 
- [RIZ92] Rizzi R., Matricardi M, Mislolczi F., On the simulation of up-looking and down-looking high-resolution radiance spectra using two different radiative transfert models. Appl Opt, (41), (1992) pp. 940-946. 

- [**ROD76**] Rodgers C.D., The vertical resolution of remotely sounded temperature profiles with a priori statistics, *J. Atmos. Sci.*, 33,(1976), pp. 707-709. 
- [**ROD00**] Rodgers C.D., *Inverse methods from atmospheric sounding. Theory and practice*, Singapour: World Scientific Publishing Company, (2000). 
- [**ROM02**] Romanov S. V., Camy-Peyret C., Payan S., CO column amount retrieval from IMG spectra using temperature and ozone regressions, *Geophys. Res. From Space, Russia*, n°3, (2002), pp. 3-9. 
- [**ROT92**] Rothman L.S., Gamache R.R., Goldman A., Brown L.R., Toth R.A., Pickett H.M., Poynter L.R.; Flaud J.M., Camy-Peyret C., Barbe A., Husson N., Rinsland C.P., Smith M.A.H., The HITRAN molecular database editions of 1991 and 1992, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 48, n°5/6, (1992), pp. 469-507
- [**ROT98**] Rothman L.S., Rinsland C.P., Goldman A., Massie S.T., Edwards D.P., Flaud J.-M., Perrin A., Camy-Peyret C., Dana V., Mandin J.-Y., Schroeder J., McCann A., Gamache R.R., Wattson R.B., Yoshino K., Chance K.V., Jucks K.W., Brown L.R., Mentchinov V., Varanasi P., The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN Atmospheric workstation) 1996 edition, *J. of Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.*, 60, (1998), pp. 665-710. 
- [**ROW75**] Rowland F.S, Molina M.J., Chlorofluoromethanes in the environment. *Rev. Geophys.*, 13, (1975), pp. 1-35. 
- [**SCHI99**] Schilling T., Lübken F.J., Wienhold F.G., Hoor P., Fischer H., TDLAS trace gas measurement within mountain waves over northern Scandinavia during POLSTAR campaign in early 1997, *Geophys. Res. Lett.*, 26, (1999), pp. 303-306. 
- [**SCH94**] Schneider R., High resolution diode laser and heterodyne spectroscopy with applications toward remote sensing, *infrared phys. Technol.* 35, (1994), pp. 477-486. 
- [**SCO71**] Scott N.A., Chedin A., A least squares procedure applied to the determination of atmospheric temperature profiles from outgoing radiance, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 11, (1971), pp. 405-420. 
- [**SCO81**] Scott N.A., Chedin A., A fast line-by-line method for atmospheric absorption computations. The automatized atmospheric absorption atlas., *J. Appl. Meteorol.* 20, (1981), pp. 801-812.
- [**SEI97**] Seinfeld J.D., Pandis S.N., *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*, John Wiley, New York, (1997). 
- [**SHA62**] Shannon C.E., Weaver W., *The mathematical theory of communication*, paperback edition, University of Illinois press, Urbana, (1962). 
- [**SIM97**] Siméoni D., Singer C., Infrared Atmospheric Sounding Interferometer, *Acta Astronautica*, Vol 40, N° 2-8, (1997), pp. 113-118. 
- [**STA92**] Stachnik R.A., Hardy J.C., Tarsala J.A., Waters J.W., Balloon-borne submillimeterwave stratospheric measurements, in: *Proc. SPIE*, Vol. 1717, 1992, pp. 433-440. 
- [**TE01**] Té Y., Spectro-radiométrie par transformée de Fourier sous ballon stratosphérique pour l'étude du système atmosphère/surface/nuages par visée au nadir, Thèse de l'Université de Pierre et Marie Curie, Paris VI, (2001). 
- [**TE02**] Té Y., Jeseck P., Camy-Peyret C., Payan S., Perron G., Aubertin G., Balloonborne calibrated spectroradiometer for atmospheric nadir sounding, *Applied Optics*, Vol. 42, N° 30, (2002), pp. 6431-6441. 

- [**THI97**] Thibault F., Menoux V., Le Doucen R., Rosenman L., Hartmann J.M., Boulet C., Infrared collision-induced absorption by O₂ near 6.4 microns for atmospheric applications : measurements and empirical modeling, *Appl. Optics*, 35, (1997), pp. 583-567. [📖](#)
- [**TIP95**] Tipping R.H., Ma Q., Theory of the water continuum and validation, *Atmospheric Research*, 36, (1995), pp. 69-94. [📖](#)
- [**TJE03**] Tjemkes S.A., Patterson T. Rizzi R., Shephard M.W., Clough S.A., Matricardi M., Haihg J.D., Payan S., Trotsenko A., Scott N., Rayer P., Taylor J.P., Clerbaux C., Strow L.L., DeSouza-Machado S., The ISSWG line-by-line intercomparison experiment, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 77, (2003), pp. 433-453. [📖](#)
- [**TOT98**] Toth R.A., Brown L.R., Plymate C., Self-broadened widths and frequency shifts of water vapor lines between 590 and 2400 cm⁻¹, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 60, (1998), pp. 665-710. [📖](#)
- [**TOT00**] Toth R.A., Air and N₂-broadening parameters of water vapor: 604 to 2271 cm⁻¹. *J. Mol. Spectrosc.*, 201, (2000), pp. 218-243. [📖](#)
- [**TRO89**] Trotsenko A.N., Fomin B.A., Calculation of atmospheric radiation transfer parameters using a direct integration method, *Phys. Atmos. Ocean*, 24 (1), (1989), pp. 106-109. [📖](#)
- [**TUR02**] Turquety S., Hadji-Lazaro J., Clerbaux C., First satellite ozone distribution retrieved from nadir high-resolution infrared spectra, *geophys. Res. Letters*, 29(24), 10.1029/2002GL016431,(2002) [📖](#)
- [**TUR03**] Turquety S., Mesure de l'ozone troposphérique à partir d'observations satellitaires dans le domaine de l'infrarouge, Thèse de l'Université de Pierre et Marie Curie, Paris VI, (2003). [📖](#)
- [**TUR04**] Turquety S., Hadji-Lazaro J., Clerbaux C., Hauglustaine D.A., Clough S.A., Cassé V., Shlüssel P., Mégie G., Trace gas retrieval algorithm for the infrared Atmospheric Sounding Interferometer, *J. Geophys. Res.*, 109, D21301, 10.1029/2004JD00482, (2004). [📖](#)
- [**WEB87**] Webster C.R., May R.D., Simultaneous *in situ* measurements and diurnal variations of NO, NO₂, O₃, NO₂, CH₄, H₂O and CO₂ in the 40 to 26 km region using an open path tunable diode laser spectrometer, *J. Geophys Res.*, 92, (1987), pp. 11931-11950. [📖](#)
- [**WEB94**] Webster C.R., May R.D., Trimble C.A., Chave R.G., Kendall J., Aircraft ER-2 laser infrared absorption spectrometer for *in situ* stratospheric measurements of HCl, N₂O, CH₄, NO₂ and HNO₃, *Appl. Opt.*, 33, (1994), pp. 454-472 [📖](#)
- [**WET95**] Wetzell G., von Clarmann T., Oelhaf H., Fischer H., Vertical profiles of N₂O₅ along with CH₄, N₂O and H₂O in the late Arctic winter retrieved from MIPAS-B infrared limb emission measurements, *J. Geophys. Res.* 100, (1995), pp. 23173–23181. [📖](#)
- [**WHI42**] White J.U., Long optical paths of large aperture, *J. Opt. Soc. Am*, 32, (1942), pp. 285-288. [📖](#)
- [**WILD91**] Wildi F.P., New concept and performances in azimuth control of large balloon gondolas. 10th ESA Symposium on European rocket and balloon programs and related research. ESA publication SP 317, (1991), pp 357-361. [📖](#)
- [**WIL99**] Wilson S.H.S., Atkinson N.C., Smith .J.A., The development of an airborne infrared interferometer for meteorological sounding studies. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, 16, (1999), pp.1912-1927. [📖](#)
- [**YOU98**] Young S.R., Francis P.W., Barclay J., Casadevall T.J., Gardner C.A., Darroux B., Davies M.A., Delmelle P., Norton G.E., Maciejewski A.J.H., Oppenheimer C.M.M., Stix J., Watson I.M., Monitoring

SO₂ emission at the Soufriere Hills volcano: Implication for changes in eruptive conditions, *Geophys. Res. Lett.*, 25, (1998), pp. 3681-3684. 

ANNEXE A.1

Rappel de spectroscopie

Pour une molécule, le diagramme des niveaux d'énergie fait apparaître des niveaux électroniques discrets relativement espacés, décomposés en sous-niveaux vibrationnels plus serrés, chaque niveau vibrationnel étant à son tour décomposé en sous-niveaux rotationnels encore plus serrés (*Fig. II.2*).

L'énergie d'une molécule peut en première approximation s'exprimer sous la forme d'une somme d'énergies :

$$E_{\text{molécule}} \approx E_{\text{électronique}} + E_{\text{vibration}} + E_{\text{rotation}} + E_{\text{translation}} \quad (\text{A1.1})$$

associées respectivement au mouvement des électrons, à la vibration des noyaux autour de la position d'équilibre, à la rotation d'ensemble de la molécule autour de son centre de masse et à la translation en bloc de la molécule. Si l'on ne considère que les énergies susceptibles d'être échangées avec le rayonnement solaire, c'est-à-dire l'énergie électronique, de vibration

et de rotation, la variation d'énergie moléculaire correspondant à une transition spectrale s'écrit en première approximation :

$$\Delta E_{\text{transition}} \approx \Delta E_{\text{électronique}} + \Delta E_{\text{vibration}} + \Delta E_{\text{rotation}} \quad (\text{A1.2})$$

Chaque terme, dans la somme du second membre, est petit vis-à-vis de celui qui le précède.

$$\Delta E_{\text{électronique}} \geq \Delta E_{\text{vibration}} \geq \Delta E_{\text{rotation}} \quad (\text{A1.3})$$

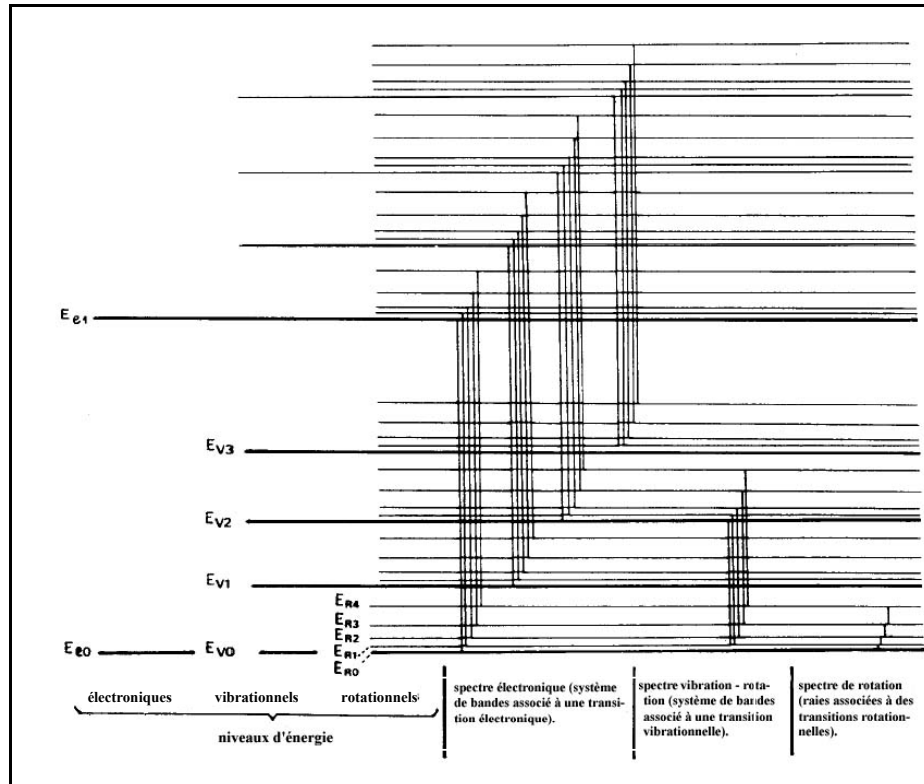


Figure A1.1 : Diagramme des transitions possibles au sein d'une molécule [AMA82].

On peut alors considérer trois types de spectres moléculaires :

- Les spectres de rotation dans lesquels l'énergie électronique et l'énergie de vibration ne changent pas ($\Delta E_{\text{électronique}} = \Delta E_{\text{vibration}} = 0$). Le spectre est formé de raies de rotation pure associées chacune à une valeur de $\Delta E_{\text{rotation}}$.
- Les spectres de vibration-rotation, dans lesquels l'énergie électronique ne change pas $\Delta E_{\text{électronique}} = 0$. Le spectre est formé de bandes associées chacune à une valeur de $\Delta E_{\text{vibration}}$. Chaque bande est constituée par des raies associées aux différentes valeurs de $\Delta E_{\text{rotation}}$.

- Les spectres électroniques constitués par des systèmes de bandes associées chacune à une valeur de $\Delta E_{\text{électronique}}$. Les bandes d'un même système correspondent à des valeurs différentes de $\Delta E_{\text{vibration}}$. Chaque bande est formée de raies associées à des valeurs différentes de $\Delta E_{\text{rotation}}$.

Dans la région infrarouge du spectre (que nous avons exclusivement considérée dans notre travail), les raies observées dans les spectres atmosphériques correspondent en général à des transitions rovibrationnelles ou de vibration-rotation avec $\Delta E_{\text{électronique}} \equiv 0$ (on reste dans l'état électronique fondamental de la molécule), et seule varie l'énergie de vibration-rotation.

Pour une molécule à N atomes le nombre de modes de vibration est de $3N-5$ quand celle-ci est linéaire et de $3N-6$ dans le cas général. Chaque mode de vibration est désigné par ν_k où k est le numéro de la vibration avec des conventions résultant de l'historique de la discipline (spectroscopie moléculaire). L'énergie vibrationnelle dans l'approximation harmonique s'écrit :

$$E_{\text{vib}}(\dots \nu_k \dots) = hc \sum_k \omega_k \left(\nu_k + \frac{d_k}{2} \right) \quad (\text{A1.4})$$

où ω_k est le nombre d'onde harmonique de la vibration k et ν_k est un nombre entier positif ou nul correspondant au nombre quantique vibrationnel et d_k le degré de dégénérescence de la vibration correspondante. Le tableau A1.1 donne, le nombre d'onde harmonique des modes de vibration pour les molécules atmosphériques les plus importantes.

Toutes les transitions vibrationnelles ne sont pas permises. En particulier les molécules homonucléaires (pour O_2 et N_2 qui apparaissent dans le tableau A.1) n'ont pas de spectre de vibration-rotation de type dipolaire électrique, mais on peut observer des transitions de type quadripolaire (O_2 et N_2) ou de type dipolaire magnétique (pour O_2). Lorsqu'une transition vibrationnelle est permise, on parle de bande. La bande ν_k (dite aussi bande fondamentale) correspond à l'ensemble des transitions rovibrationnelles entre les états vibrationnels $\nu'=(\dots \nu_k=1 \dots) \leftarrow \nu''=(\dots \nu_k=0 \dots)$ où les pointillés indiquent que tous les autres nombres quantiques vibrationnels sont nuls. La flèche va de la droite vers la gauche quand la transition vibrationnel est observée en absorption et de la gauche vers la droite lorsqu'il s'agit

d'émission. On convient toujours en spectroscopie moléculaire de noter ' (prime) le niveau supérieur et '' (second) le niveau inférieur.

	ν_1	ν_2	ν_3	ν_4	ν_5	ν_6
Gaz ammoniac (NH₃)	3337	950	3444	1627	-	-
Dioxyde de carbone (CO₂)	1388	667	2349	-	-	-
Monoxyde de carbone (CO)	2143	-	-	-	-	-
Tétrachlorure de carbone (CCl₄)	464	217	799	316	-	-
Fluorure de carbonyle (COF₂)	1945	963	582	1243	619	774
Oxysulfure de carbone (OCS)	859	520	2062	-	-	-
Oxyde de chlore (ClO)	884	-	-	-	-	-
Bromure d'hydrogène (HBr)	2559	-	-	-	-	-
Chlorure d'hydrogène (HCl)	2886	-	-	-	-	-
Cyanure d'hydrogène (HCN)	3311	713	2097	-	-	-
Fluorure d'hydrogène (HF)	3961	-	-	-	-	-
Iodure d'hydrogène (HI)	2230	-	-	-	-	-
Peroxyde d'hydrogène (H₂O₂)	3593	1396	866	259	3560	1236
Sulfure d'hydrogène (H₂S)	2615	1183	2626	-	-	-
Méthane (CH₄)	2917	1534	3019	1306	-	-
Monoxyde d'azote (NO)	1875	-	-	-	-	-
Diazote (N₂)	2330	-	-	-	-	-
Dioxyde d'azote (NO₂)	1320	750	1617	-	-	-
Protoxyde d'azote (N₂O)	2224	589	1285	-	-	-
Oxygène (O₂)	1556	-	-	-	-	-
Ozone (O₃)	1103	701	1042	-	-	-
Anhydride sulfureux (SO₂)	1152	518	1362	-	-	-
Hexafluorure de soufre (SF₆)	775	643	948	615	524	346
Eau (H₂O)	3657	1595	3756	-	-	-

Tableau A1.1 : Principaux modes de vibration pour certaines molécules atmosphériques dans le domaine 500 et 3600 cm⁻¹ dans la base spectroscopique HITRAN (en cm⁻¹). On donne les valeurs des nombres d'onde harmoniques ω_k pour l'isotope le plus important de l'espèce et pour l'état électronique le plus bas. En rouge sont signalés les modes doublement dégénérés ($d_k = 2$) et en bleu les modes triplement ($d_k = 3$) dégénérés.

(source : <http://cfa-www.harvard.edu/HITRAN/>).

Dans les spectres infrarouges, si la résolution spectrale est suffisante, on observe des signatures spectrales rovibrationnelles ou raies individuelles. Dans le spectre vibrationnel d'une molécule en phase gazeuse, une branche est constituée des raies d'absorption correspondant à des valeurs particulières de $\Delta J = J' - J''$, la variation du nombre quantique rotationnel principal. Un spectre infrarouge est généralement constitué de trois branches. La

branche P regroupe les raies avec $\Delta J = -1$, la branche Q les raies avec $\Delta J = 0$, et la branche R les raies avec $\Delta J = +1$ (Fig. A1.1 et Fig. A1.2)

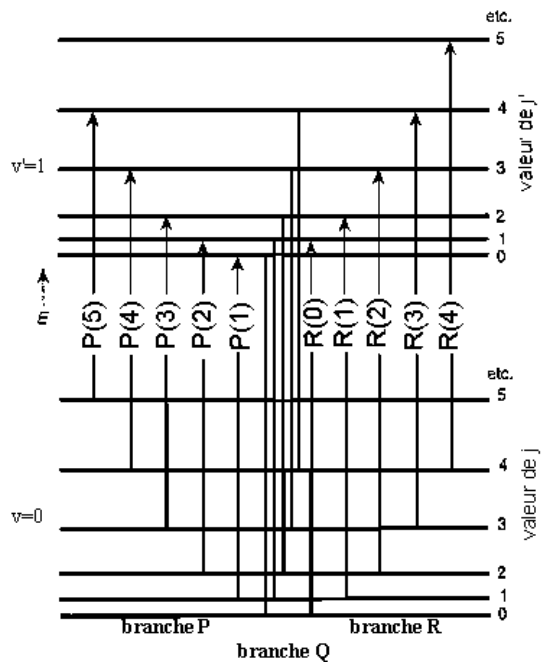


Figure A1.2 : Diagramme des transitions rotationnelles entre 2 niveaux vibrationnels non dégénérés ($d_k=1$) pour une molécule linéaire.

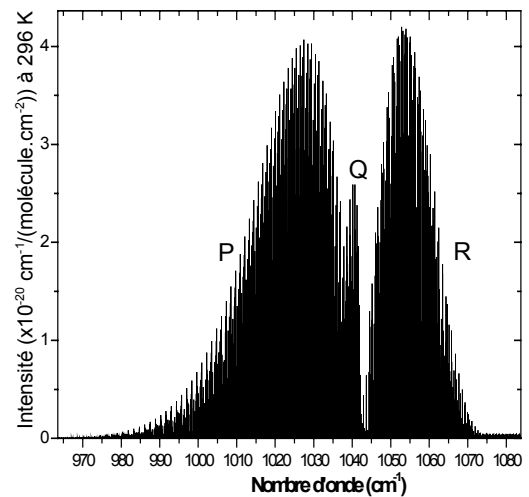


Figure A1.3 : Extrait du spectre théorique HITRAN pour l'ozone où l'on peut observer les différentes branches (P, Q et R) pour la transition vibrationnelle ν_3 .

ANNEXE A.2

Entropie informationnelle spectrale et cumulée sur un intervalle

En reprenant les notations du paragraphe III.4.2, on définit la matrice \tilde{K} dont les valeurs singulières sont les λ_i par :

$$\tilde{K} = S_\varepsilon^{-1/2} K S_a^{1/2} \quad (3.19) = (A2.1)$$

Les éléments de la matrice K, sont les valeurs des jacobiens

$$K_{j,k} = \frac{\partial y_j}{\partial x_k} \quad j = 1, m \text{ nombre de points dans le spectre} \quad (A2.2)$$

$$k = 1, n \text{ nombre de paramètres}$$

Dans les équations

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \ln(1 + \lambda_i^2) = \sum_{i=1}^n H_i \quad (A2.3)$$

et

$$d_s = \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i^2}{1 + \lambda_i^2} = \sum_{i=1}^n d_{s_i} \quad (\text{A2.4})$$

l'indice i utilisé correspond au numéro de la valeur propre et non pas au numéro du paramètre. Il n'y a pas de bijection, mais le nombre de valeurs singulières est égal au nombre n de paramètres.

Lorsque les matrices S_ε (bruit dans le spectre) et S_a (erreurs *a priori* sur les paramètres) sont diagonales, les éléments de matrice de l'équation (A2.1) s'écrivent :

$$\tilde{K}_{j,k} = (S_\varepsilon^{-1/2})_{j,j} K_{j,k} (S_a^{1/2})_{k,k} \quad (\text{A2.5})$$

Pour un intervalle spectral $[j_1, j_2]$, on peut donc définir comme dans l'équation (3.22) le carré de la valeur singulière :

$$\lambda_k^2[j_1, j_2] = \tilde{K}_k^T \tilde{K}_k = \sum_{j=j_1}^{j_2} (\tilde{K}_{j,k})^2 = \sum_{j=j_1}^{j_2} (S_\varepsilon^{-1}) \tilde{K}_{j,k}^2 (S_a)_{k,k} \quad (\text{A2.6})$$

Si le bruit dans le spectre ne dépend pas de la variable spectrale ou de l'indice j de l'élément spectral considéré (spectres non apodisés en spectroscopie de Fourier avec échantillonnage minimal au sens de Nyquist), alors :

$$(S_\varepsilon^{-1})_{j,j} = 1/S_\varepsilon \quad (\text{A2.7})$$

pour simplifier la notation, on peut aussi écrire l'erreur *a priori* sur le paramètre k :

$$(S_a)_{k,k} = S_k \quad (\text{A2.8})$$

Alors l'équation (A2.6) se ré-écrit :

$$\lambda_k^2[j_1, j_2] = \frac{S_k}{S_\varepsilon} \sum_{j=j_1}^{j_2} \tilde{K}_{j,k}^2 \quad (\text{A2.9})$$

La somme sur j porte sur les points de la fenêtre ou de la micro-fenêtre considérée. C'est la somme sur l'intervalle spectral correspondant du carré du jacobien pondéré par le bruit

dans le spectre S_ε et par l'erreur *a priori* sur le paramètre k , ce qui rend bien λ_k^2 sans dimension.

On fait alors une correspondance (qui n'est justifiée que si la corrélation entre les différents paramètres est faible) qui consiste à remplacer l'équation (A2.3) par une équation analogue :

$$H = \sum_{k=1}^n H_k \quad (\text{A2.10})$$

avec pour un intervalle $[j_1, j_2]$:

$$H_k [j_1, j_2] = \frac{1}{2} \ln(1 + \lambda_k^2 [j_1, j_2]) \quad (\text{A2.11})$$

On peut donc en principe définir l'entropie informationnelle pour un point spectral individuel :

$$H_k [j, j] = \frac{1}{2} \ln(1 + \lambda_k^2 [j, j]) \quad (\text{A2.12})$$

avec :

$$\lambda_k^2 [j, j] = \frac{S_k}{S_\varepsilon} K_{j,k}^2 \quad (\text{A2.13})$$

Dans la mesure où la contribution d'un point spectral individuel est faible, on doit pouvoir écrire :

$$H_k [j, j] \approx \frac{1}{2} \frac{S_k}{S_\varepsilon} K_{j,k}^2 \quad (\text{A2.14})$$

Entropie informationnelle sur un intervalle composée de 2 sous-intervalles

Lors de l'étude de N_2O , on a vu que dans l'intervalle $1145 - 1320 \text{ cm}^{-1}$ on pouvait restituer N_2O dans 2 sous-intervalles $1145 - 1195 \text{ cm}^{-1}$ et $1240 - 1320 \text{ cm}^{-1}$. On peut se poser la question de savoir comment relier l'entropie informationnelle H_1 sur l'intervalle $I_1 = [1, j]$ à l'entropie informationnelle H_2 sur l'intervalle complémentaire $I_2 = [j+1, m]$ et à l'entropie

H_{1+2} sur l'intervalle complet $I_{1+2} = [1, m]$. Avec les notations introduites plus haut, on montre facilement que :

$$H_2 = \frac{1}{2} \ln[1 + \exp(2H_{1+2}) - \exp(2H_1)] \quad (\text{A2.15})$$

Entropie informationnelle incrémentielle

Comme on l'a introduit rapidement dans au paragraphe III.4.2 on peut définir rigoureusement l'accroissement de l'entropie informationnelle pour le paramètre k en passant de l'intervalle $[1, j]$ à l'intervalle $[1, j+1]$ (balayage de l'intervalle spectrale de gauche à droite) par :

$$h_k^+(j + \frac{1}{2}) = H_k[1, j+1] - H_k[1, j] \quad (\text{A2.16})$$

De la même façon on peut définir une quantité analogue lorsqu'on balaye l'intervalle spectral de droite à gauche :

$$h_k^-(j + \frac{1}{2}) = H_k[j, m] - H_k[j+1, m] \quad (\text{A2.17})$$

Dans les 2 équations précédentes, on introduit l'indice demi-entier $j + \frac{1}{2}$ pour être rigoureux sur le plan mathématique et on doit avoir $1 \leq j \leq m-1$.

On montre alors (par utilisation de la dérivée au point $j + \frac{1}{2}$) avec un retour aux indices entiers du spectre qu'on peut écrire approximativement pour $2 \leq j \leq m-2$:

$$h_k^+(j) = h_k(i) \exp[-2H_k^+(j-1)] \quad (\text{A2.18})$$

et

$$h_k^-(j) = h_k(i) \exp[-2H_k^-(j+1)] \quad (\text{A2.19})$$

Avec l'entropie informationnelle spectrale (pour un point) définie comme en (A2.14) c'est à dire :

$$h_k[j] = \frac{1}{2} \frac{S_k}{S_\varepsilon} K_{j,k}^2 \quad (\text{A2.20})$$

L'entropie informationnelle cumulée à droite s'écrit :

$$H_k^+(j) = \sum_{l=1}^j h_k^+(l) = H_k[1, j] \quad (\text{A2.21})$$

et l'entropie informationnelle cumulée de droite à gauche est donnée par :

$$H_k^-(j+1) = \sum_{l=j+1}^m h_k^-(l) = H_k[j+1, m] \quad (\text{A2.22})$$

Les formules ci-dessus sont valables sur tout l'intervalle $1 \leq j \leq m$, si l'on convient d'écrire :

$$h_k^+(1) = h_k(1) \quad (\text{A2.23})$$

$$h_k^-(m) = h_k(m) \quad (\text{A2.24})$$

et de façon générale

$$H_k[j_1, j_2] \equiv 0 \text{ si } j_2 < j_1 \quad (\text{A2.25})$$

On a donc montré la cohérence entre la définition de l'accroissement d'entropie informationnelle, lorsqu'on la calcule sur un intervalle $[1, j]$ et sur l'intervalle étendu d'un point $[1, j+1]$ avec la définition locale (A2.18), (A2.19) et (A2.20) faisant intervenir l'entropie informationnelle cumulée. Les formules (A2.18) et (A2.19) montrent bien que l'information finit par « saturer » lorsqu'on a déjà balayé une partie notable de l'intervalle où les raies contribuent au paramètre k . On voit aussi que l'apport d'information sera différent selon qu'on balaye l'intervalle de gauche à droite ou de droite à gauche, mais il existe une relation analogue à (A2.15) entre les entropies cumulées dans les 2 sens :

$$H_k^-(j+1) = \frac{1}{2} \ln[1 + \exp(2H_{tot}) - \exp(2H_k^+(j))] \quad (\text{A2.26})$$

avec pour $1 \leq j \leq m-1$:

$$H_k^+(j) = H_k[1, j] \quad (\text{A2.27})$$

$$H_k^-(j+1) = H_k[j+1, m] \quad (\text{A2.28})$$

et avec :

$$H_{tot} = H_k[1, m] \quad (\text{A2.29})$$

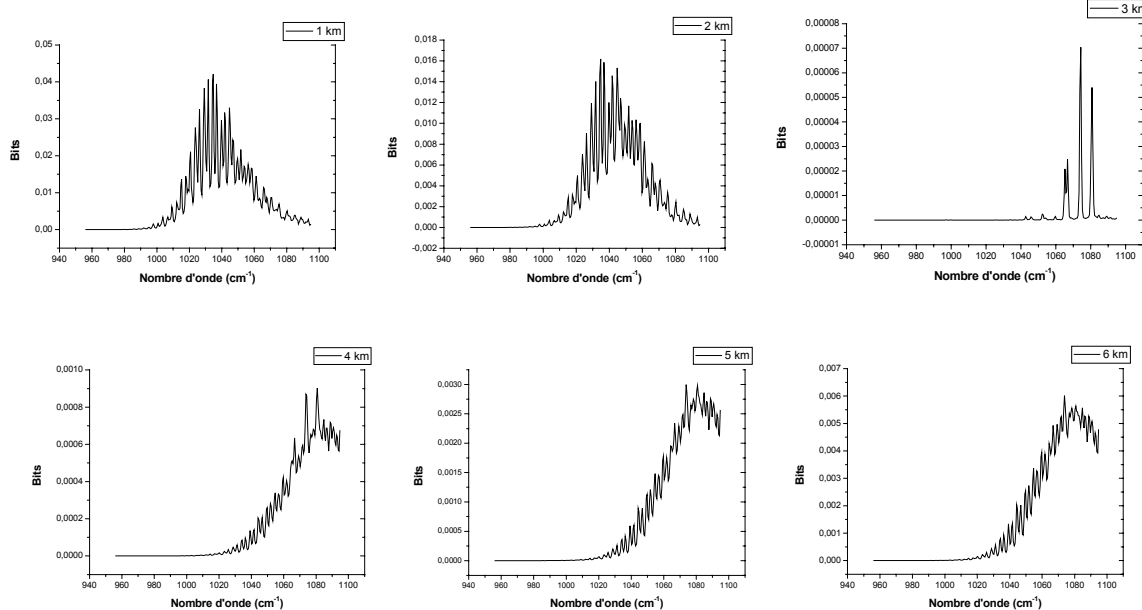
$$H_k^-(1) = H_{tot} \quad (\text{A2.30})$$

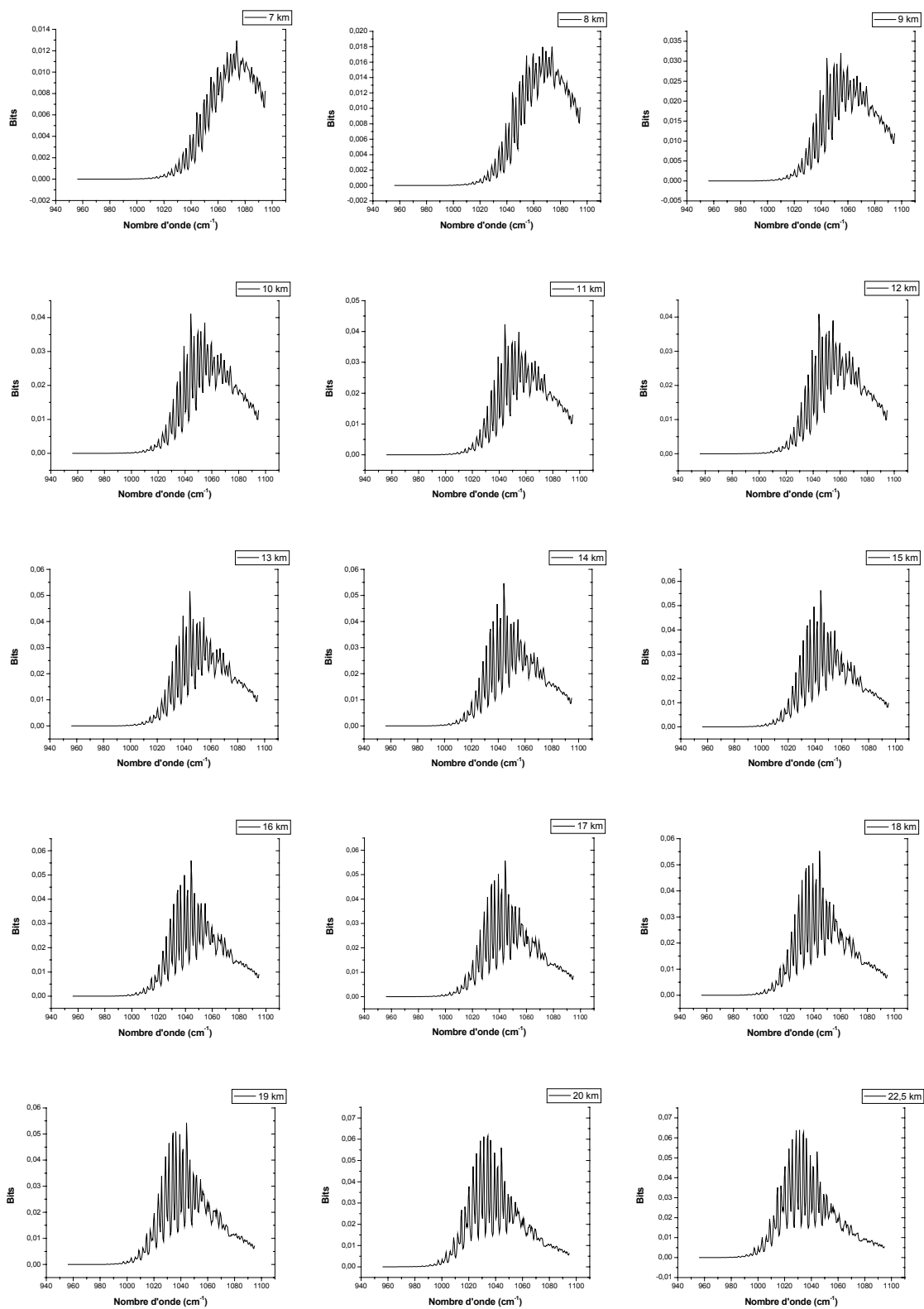
$$H_k^+(m) = H_{tot} \quad (\text{A2.31})$$

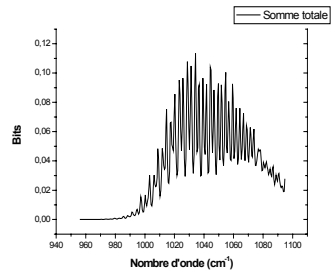
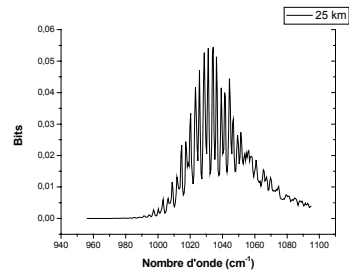
L'entropie informationnelle spectrale (sans cumul) $h(j) = \frac{1}{2} \frac{S_k}{S_\varepsilon} K_{j,k}^2$ permet de repérer dans un intervalle donné quels sont les points spectraux qui contribuent le plus *a priori* à l'information cumulée (ce qui dépendra du point de départ et du sens de balayage de l'intervalle). Des exemples d'entropie cumulée comme fonction du point de l'intervalle 2000 - 2200 cm^{-1} ont été montrés dans la figure III.28 pour les constituants qui contribuent principalement à cet intervalle. Pour la bande de l'ozone (intervalle 950 – 1095 cm^{-1}), on montre le même type d'information spectrale à la résolution IASI-ballon dans la figure III.29 et à la résolution IASI/MetOp dans l'Annexe A.3.

ANNEXE A.3

Entropie informationnelle pour l’ozone dans la fenêtre vers 950 – 1100 cm^{-1} à la résolution IASI/MetOp.







ANNEXE A.4

Cellule à gaz réalisée au LPMA pour la calibration de l'instrument IASI/MetOp.

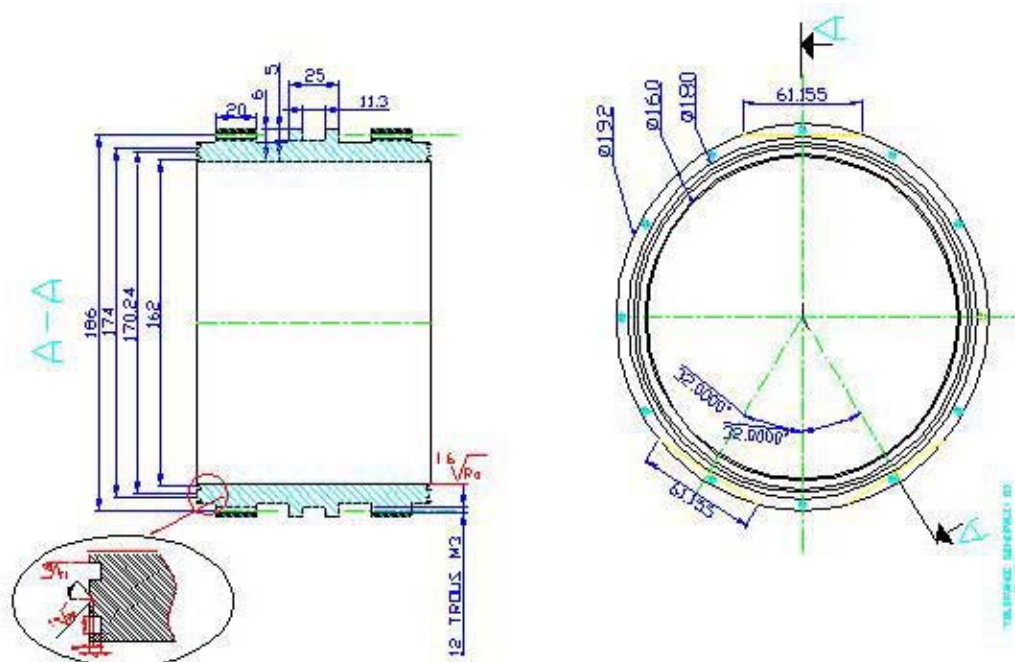
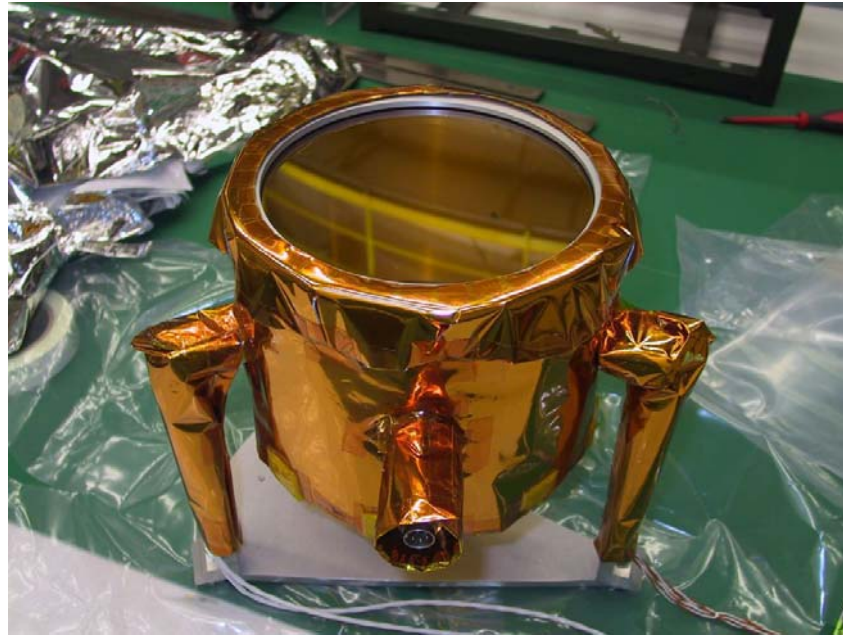
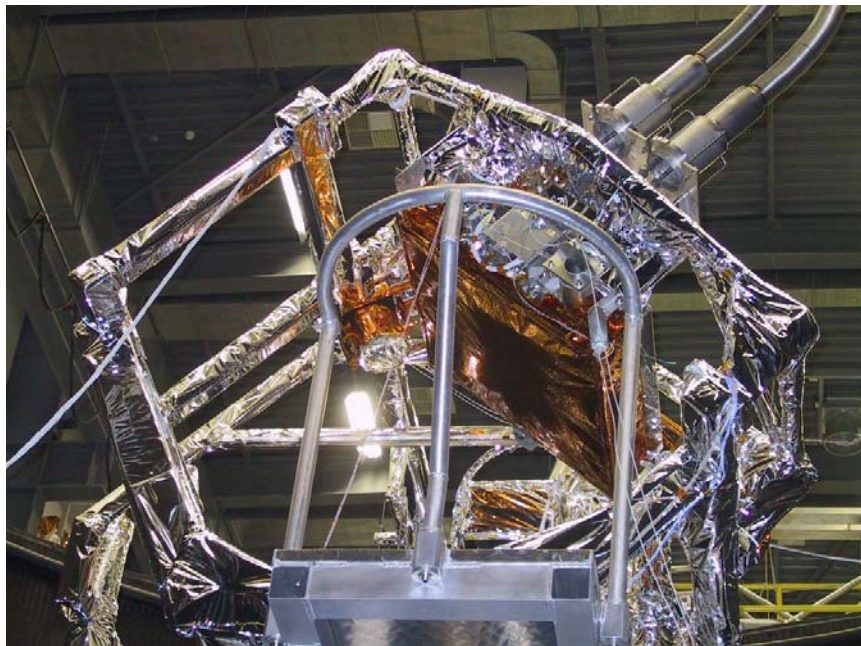


Schéma de la cuve (côtes en mm) d'après G. Lerille et D. Mayèle



a)



b)

Cellule à gaz lors de la phase de test à l'ESTEC

Title

Retrieval of infrared spectra in thermal emission of the low Earth's atmosphere recorded under balloon by Fourier transform spectroscopy in nadir looking: preparation of space mission IASI

Keywords

Retrieval method - nadir - radiative transfer - thermal emission - averaging kernels - weight functions - informational entropy - tropospheric ozone - O₃ - CH₄ - N₂O - CO - IASI-balloon - vertical profile of concentration - total column - molecular spectroscopy - gas cell -

Abstract

In the framework of the preparation to the space mission IASI/MetOp, the LPMA is obtaining thermal infrared emission spectra of the lower atmosphere in the nadir viewing geometry using the IASI-balloon experiment. From these spectra, we have examined in this thesis the retrieval of columns and profiles of species of atmospheric importance by combining a radiative transfer model and an inversion algorithm. Processing spectra recorded during the IASI02 balloon flight allowed us to determine the O₃ profile as well as CH₄, N₂O and CO total columns. These results were compared with those obtained with the SCIAMACHY instrument onboard the ENVISAT satellite. Among the tools available for solving inverse problems, weighting functions, averaging kernels and informational entropy were used to establish fitting procedures and to improve the quality of the retrievals. The impact of spectral resolution was assessed by comparing retrievals based on IASI-balloon spectra with retrievals performed on IASI-like spectra generated by convolution of the experimental balloon spectra in order to match the IASI/MetOp resolution. Based on detailed simulations of the absorption/emission by various gases, a cell containing a mixture of CO and NH₃ has been proposed and later produced by LPMA for CNES. Together with our gas cell model, it can now be used to perform (in a thermal vacuum chamber before launch) a detailed characterization of the spectral performances of the IASI satellite instrument.

Titre

Inversion de spectres infrarouges en émission thermique de la basse atmosphère terrestre enregistrés sous ballon par transformée de Fourier en visée au nadir : préparation de la mission spatiale IASI.

Mots clefs

Méthode d'inversion – nadir – transfert radiatif – émission thermique - noyaux moyens - fonctions de poids - entropie informationnelle - ozone troposphérique - O₃ - CH₄ - N₂O - CO - IASI-ballon - profil vertical de concentration - colonne totale - spectroscopie moléculaire - cellule à gaz-

Résumé

Dans le cadre de la préparation à la mission spatiale IASI/MetOp le LPMA effectue des enregistrements de spectres d'émission dans l'infrarouge en visée au nadir de la basse atmosphère à l'aide de l'expérience IASI-ballon. Nous nous sommes intéressés à la restitution de colonnes et profil de molécules d'importance atmosphérique en simulant le transfert radiatif et en effectuant l'inversion des spectres infrarouges. Le traitement des spectres du vol IASI02 a permis la détermination du profil de O₃ ainsi que la colonne totale de CH₄, N₂O et CO. Ces résultats ont été comparés avec ceux obtenus avec l'instrument SCIAMACHY/ENVISAT. En utilisant des outils comme les fonctions de poids, les noyaux moyens et l'entropie informationnelle nous avons amélioré la qualité des ajustements et mis en place des procédures de traitement systématique des spectres. La comparaison de nos résultats avec les spectres dégradés à la résolution IASI/MetOp et les spectres IASI-ballon permet d'estimer la précision des produits (profils ou colonnes) qui pourront être inversés à partir des spectres qui doivent être enregistrés par IASI en orbite. Basé sur la simulation détaillée de l'absorption/emission par divers gaz, une cellule contenant un mélange de CO et de NH₃ a été produite par LPMA pour CNES ainsi que le modèle la cellule de gaz qui peut maintenant être employé pour effectuer une caractérisation des performances spectrales (dans une chambre vide avant le lancement) de l'instrument de satellite d'IASI.