



HAL
open science

Analyse et prévision de l'ozone issues d'une assimilation de données satellitaires à haute résolution

Benjamin Pajot

► **To cite this version:**

Benjamin Pajot. Analyse et prévision de l'ozone issues d'une assimilation de données satellitaires à haute résolution. Océan, Atmosphère. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2011. Français. NNT : . tel-00713190

HAL Id: tel-00713190

<https://theses.hal.science/tel-00713190>

Submitted on 29 Jun 2012

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.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Université Toulouse III – Paul Sabatier
Spécialité : Physique et Chimie de l'Atmosphère

Présentée et soutenue par

Benjamin PAJOT

Le 12 décembre 2011

Analyse et prévision de l'ozone issues d'une assimilation de données satellitaires à haute résolution

Jury :

Jean-Luc Attié	Professeur des universités	Président
Slimane Bekki	Directeur de recherche	Rapporteur
Franck Lefèvre	Directeur de recherche	Examineur
Jean-Noël Thépaut	Ingénieur en chef des Ponts, Eaux et Forêts	Examineur
Thierry Phulpin	Expert senior ingénieur mission	Invité

École doctorale : Sciences de l'Univers, de l'Environnement et de l'Espace
Directeurs de Thèse : Daniel Cariolle, Ingénieur général des Ponts, Eaux et Forêts
Sébastien Massart, Chercheur
Rapporteur : Laurent Menut, Chargé de recherche CNRS

Travaux effectués au CERFACS
Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique
au sein de l'unité de recherche Aviation Environnement
42, avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France

Mis en page avec la classe thloria.

Remerciements

En 2006, j'ai dû réaliser un stage dans le cadre de ma formation d'ingénieur et c'est avec la recommandation de mon responsable de filière que je l'ai effectué au sein du CERFACS. Je tiens donc à commencer mes remerciements en les adressant à Dominique Eyheramendy, autant pour la qualité de ses enseignements et de ses conseils que pour la disponibilité qu'il continue à témoigner longtemps après l'obtention de mon diplôme.

Au Cerfacs, Thierry Morel m'a donc accueilli pour une durée d'un mois. C'est la première fois qu'un scientifique me demande de le tutoyer. Je profite des pauses café/chocolat pour l'interroger sur des considérations informatiques n'ayant pas grand chose à voir avec le sujet de mon stage. Merci d'avoir chaque fois étancher ma curiosité et de m'avoir aidé à percer les arcanes de PALM. Je te dois toujours une fiche technique à mettre en ligne (prochainement, c'est promis).

Deux ans plus tard, j'ai prolongé mon expérience de cerfacsien pour une durée de quatre mois. Cette fois, Sophie Ricci et Sébastien Massart m'ont accueilli. Leur sens de la pédagogie me familiarise aux techniques de l'assimilation de données dans les meilleures conditions. Merci pour vos conseils avisés. D'aucuns m'avaient mis en garde concernant les conditions dans lesquelles j'effectue mon doctorat, mais ce stage me convainc de m'engager dans la voie de la recherche.

Cette thèse s'effectue au sein de l'équipe Aviation et Environnement dans le cadre d'un financement accordé par la Fondation d'Entreprise EADS. Je souhaite remercier Daniel Cariolle, mon directeur de thèse, qui m'a accueilli dans son équipe. Il m'a permis de travailler librement, une liberté qui n'a pas empêché pas d'exiger la rigueur nécessaire au travail scientifique, notamment lors de la rédaction d'un article destiné au journal *Atmospheric Chemistry and Physics*. Merci de m'avoir incité à participer à l'école d'hiver ERCA, l'une des formations les plus passionnantes auxquelles j'ai pu assister jusqu'à aujourd'hui. Pour faire court, merci à Daniel d'avoir rempli avec bienveillance son rôle de directeur.

Je me dois aussi de remercier mon codirecteur de thèse Sébastien Massart. Il m'a guidé non seulement dans mon travail quotidien, mais aussi sur des sentiers de course ou des murs d'escalade. Sur tous les plans, un jeune Padawan je demeure. Je ne pense pas que beaucoup de thésards aient eu ma chance.

Cette chance s'est personnifiée également par les autres membres de l'équipe Aviation Environnement. J'ai apprécié la bonne humeur de ceux de la première heure qui volent à présent de leurs propres ailes : Laurent, Claire et Audrey ; comme celle de ceux qui suivront inéluctablement cet exode : Joris, Alexis, Adèle, Élodie et Odile. Ainsi va la recherche. Quoi qu'il en soit, il a été agréable de toujours pouvoir trouver conseil auprès de vous durant ces 3 années, de partager cette expérience de néoassimilateur avec Élodie et de m'aérer l'esprit avec Odile (psychologiquement essentiel). De plus nos réunions ont généralement été culinairement roboratives, ce qui n'a rien gâté à l'affaire !

Bien entendu je remercie aussi la partie italienne de cette équipe formée par ses deux piliers que sont Roberto et Andrea. Merci Roberto pour tes encouragements discrets mais sincères et profonds, et merci Andrea pour la mine de connaissances, les dépannages le dimanche ou depuis Venise sous le feu des volatiles, ainsi que la joie de vivre.

Merci également à l'équipe informatique du Cerfacs, Isabelle d'Ast, Gérard Dejean, Fabrice Fleury, Patrick Laporte et Nicolas Monnier, d'une disponibilité et d'une réactivité sans pareil. Merci d'avoir remonté les nœuds d'Octopus que je faisais tomber de manière plus que répétitive, d'avoir chassé des trous noirs informatiques. . . sans jamais vous être départis de votre sourire.

Merci aux autres assimilateurs cerfacsiens, Isabelle Mirouze, Sophie Ricci, Anthony Weaver et Olivier Titaud, pour la richesse des échanges et le soutien moral.

Merci à Isabelle Moity d'avoir résolu les casse-têtes récurrents des déplacements, les miens comme ceux du jury, à Michèle Campassens pour la partie administrative et juridique des casse-têtes, et à Chantal Nasri et Nathalie Brousset pour tout un tas d'autres problèmes.

Je tiens également à remercier Olivier Pannekoucke et William Lahoz d'avoir rédigé avec moi mon premier article scientifique en tant que premier auteur. Les réunions pendant lesquelles je vous exposais mes travaux ont été très fructifiantes et votre regard critique apprécié.

Je remercie aussi Cathy Clerbaux pour sa participation à ce même article et pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse. Si le CNES n'avait pas fêté ses 50 ans le même jour, nous aurions eu la chance de sa présence à ma soutenance.

Un grand merci évidemment à mes deux rapporteurs pour l'attention qu'ils m'ont prêté. Merci à Laurent Menut d'avoir terminé sa lecture et son rapport malgré la survenue d'un accident de moto. Merci à Slimane Bekki pour les conversations (depuis celle d'ERCA sur le rôle du Marché - qui m'a fait manquer le début d'une présentation - à celles des Lecques). Il serait assurément plaisant de collaborer ensemble dans le futur.

Enfin merci aux autres membres du jury, Jean-Luc Attié, Franck Lefèvre, Thierry Phulpin et Jean-Noël Thépaut, d'avoir pris de votre temps pour venir m'écouter. Ce fut un grand honneur.

Il ne faut pas oublier les soutiens extérieurs au travail. Celui de mes colocataires et amis d'une part. Pour m'encourager et me faciliter la vie dans les moments éprouvants. Parfois j'en aurais oublié de me sustenter si vous n'aviez pas été là.

Celui des amis plus lointains qui pour certains ont pris la peine de faire un long trajet afin d'assister à une soutenance qu'ils ont dû trouver quelque peu obscure (par moments seulement j'espère).

Merci à toute ma famille d'être ce qu'elle est. J'ai beaucoup appris de vous tous pour devenir le Docteur mûr que je suis désormais.

Merci à mes parents pour les sacrifices afin que leurs enfants ne manquent de rien et qu'ils puissent réaliser leurs études dans de bonnes conditions.

Et pour terminer, un merci infini à Véronique. Merci d'avoir supporté cette relation à distance trois années durant. Cette relation inimaginable pour certains, ce travail qui m'accaparait tant si souvent, tu t'en es accommodée pour nous.

*Écrire est ouvrir une porte dans l'espace. Et le remplir.
Extrait de Clandestine(s) ou la tradition du couchant,
Jacques Renaud, écrivain québécois.*

À mes amis, à ma famille, à mon Amour.

Table des matières

Résumé	ix
Abstract	xi
Introduction	1

Partie I La chimie atmosphérique

1 Description de l'atmosphère	9
1.1 Composition de l'atmosphère	10
1.1.1 Les espèces gazeuses dans l'atmosphère	10
1.1.2 La structure verticale de l'atmosphère	12
1.2 Notions utiles	14
1.2.1 La photochimie	14
1.2.2 Le temps de vie d'une espèce chimique	16
2 Dynamique stratosphérique	19
2.1 La circulation stratosphérique générale	20
2.1.1 Structure thermique	20
2.1.2 Circulation zonale et méridienne	21
2.2 Événements dynamiques particuliers	22
2.2.1 Le vortex polaire	22
2.2.2 Les ondes de Rossby	22
2.2.3 Les échanges stratosphère-troposphère	23

3 Chimie de l’ozone	25
3.1 Description du champ d’ozone	25
3.2 Équilibre naturel de l’ozone stratosphérique	28
3.3 Le trou de la couche d’ozone	29
4 La chimie atmosphérique vue depuis l’espace	33
4.1 Caractéristiques des mesures chimiques satellitaires	33
4.2 Caractéristiques des instruments MLS et IASI et de leurs satellites	36
4.2.1 L’instrument MLS embarqué à bord du satellite <i>Aura</i>	36
4.2.2 L’instrument IASI embarqué à bord du satellite <i>Metop-A</i>	37

Partie II Les outils numériques

1 L’assimilation de données	45
1.1 Formalisme mathématique et concepts	46
1.1.1 Définitions	47
1.1.2 L’assimilation de données comme un problème inverse	49
1.2 La prise en compte des erreurs	50
1.2.1 De l’importance des erreurs	50
1.2.2 Une approche statistique	51
1.3 La résolution du problème inverse	53
1.3.1 Récapitulatif	53
1.3.2 Vers les méthodes variationnelles	53
1.3.3 Quelques méthodes variationnelles classiques	54
2 Le modèle Mocage	59
2.1 Les modèles de chimie-transport	59
2.2 Les caractéristiques principales de MOCAGE	60
2.3 Le schéma chimique Cariolle	62
2.3.1 L’intérêt du schéma linéaire	62
2.3.2 Description	63
3 Le système Valentina	65
3.1 Le coupleur Palm	65
3.2 Modélisation des matrices de covariance d’erreur	66
3.2.1 Simplification de \mathbf{R}	66

3.2.2	Décomposition de \mathbf{B}	68
3.2.3	Représentation des variances	68
3.2.4	L'opérateur de corrélation \mathbf{C}	69
3.3	Les coefficients correctifs multiplicatifs pour les matrices de covariance d'erreur	71
3.3.1	La théorie	71
3.3.2	L'utilisation pratique dans Valentina	72

Partie III Mise en place du système d'analyse haute résolution

1	L'assimilation en harmoniques sphériques	81
1.1	Les harmoniques sphériques	81
1.2	Les espaces physique et spectral d'expression du champ d'ozone	83
1.2.1	Notations	83
1.2.2	Équivalence des produits scalaires	85
1.3	Décomposition et réécriture de la fonction coût	85
1.3.1	Décomposition de l'opérateur \mathbf{B}	85
1.3.2	Préconditionnement	86
1.3.3	Gradient	87
2	L'algorithme de la boucle externe	89
2.1	La boucle externe appliquée au 3D-FGAT	90
2.2	Le calcul des coefficients correcteurs avec boucle externe	91
3	Combinaison de la boucle externe avec le 3D-FGAT	93
3.1	Avantages et défauts de la boucle externe combinée au 3D-FGAT	93
3.1.1	Expérience numérique	93
3.1.2	Résultats	94
3.2	Article publié au journal <i>Mon. Wea. Rev.</i>	99
3.2.1	Résumé de l'article	99
3.2.2	Article	100
3.2.3	Conclusions	115
3.3	Conséquence : l'adoption du 4D-Var	115

Partie IV Assimilation de données haute résolution

1 Article soumis au journal <i>Atm. Che. Phy.</i>	123
--	------------

Partie V Perspectives

1 Vers une prise en compte optimale de l'information des observations à haute répartition spatiale	145
2 Vers un perfectionnement du processus d'assimilation de données	149

Conclusions	151
--------------------	------------

Partie VI Annexes

A Introduction aux méthodes stochastiques	155
B Normalisation dans le cas isotrope homogène	157
C Résolution de l'équation de diffusion en spectral	159
D Écriture de la fonction coût de l'ébauche dans l'espace spectral	161
Table des figures	163
Liste des tableaux	165
Glossaire	167
Index	169
Bibliographie	171

Résumé

Pour améliorer la représentation du champ d’ozone atmosphérique fournie par des observations ou bien par un modèle numérique, on peut combiner ces deux sources d’information par des techniques d’assimilation de données. La taille des pixels des données issues des instruments embarqués à bord des satellites de dernière génération est cependant bien inférieure à la résolution horizontale couramment utilisée dans les Modèles de Chimie-Transport (MCT) en version globale. Ainsi ces observations apportent de l’information sur des structures de petite échelle du champ d’ozone ne pouvant être représentées par le modèle qu’avec l’augmentation de sa résolution.

Dans le but d’assimiler l’information de petite échelle au sein du MCT MOCAGE de Météo-France avec une grille horizontale haute résolution tout en conservant un coût d’exécution raisonnable, nous avons développé une version spectrale du système d’assimilation de données Valentina du Cerfacs. Puis nous utilisons l’algorithme de la boucle externe conjointement avec la méthode variationnelle 3D-Var avec FGAT. Nous montrons que cette combinaison dégrade les analyses dans le cas de situations atmosphériques dominées par le transport. En conséquence, nous optons dans la suite pour la méthode variationnelle 4D-Var en terme d’incrément pour procéder aux simulations d’ozone haute résolution.

Nous utilisons le système Valentina avec le MCT MOCAGE à basse et haute résolutions horizontales sur le mois de septembre 2008 durant lequel des structures de petite échelle sont présentes dans le champ d’ozone au voisinage du vortex polaire antarctique. Les colonnes totales d’ozone de l’instrument IASI, choisies pour leur haute répartition spatiale, ont été moyennées sur grilles modèle basse et haute résolution en deux jeux de super-observations. Nous les combinons aux profils d’ozone de l’instrument MLS pour contraindre la répartition verticale de l’information dans la stratosphère et la haute troposphère lors du processus d’assimilation de données.

L’augmentation de résolution du modèle améliore les simulations directes du MCT et, dans une moindre mesure, les analyses issues de l’assimilation du jeu de données combinées basse résolution. En revanche, l’augmentation de résolution dans les super-observations conduit à une dégradation des analyses à certains niveaux verticaux car les données de MLS qui contraignent la structure verticale du profil d’ozone sont éparées par rapport aux données de IASI. Nous mettons ce résultat en lien avec le besoin d’avoir une source d’information sur la distribution verticale de l’ozone aussi dense que le jeu de données de colonnes totales assimilées telle l’information fournie par les *Averaging Kernels*.

Mots-clés: chimie atmosphérique, ozone, assimilation de données variationnelle, *Metop-A*/IASI.

Abstract

To improve the representation of the atmospheric ozone field given by some observations or a numerical model, one can combine these two sources of information by data assimilation techniques. The pixel size of the data coming from the instruments on board the latest generation of satellites is however much lower than the horizontal resolution usually used within global Chemical-Transport Models (CTMs). These data bring information on small-scale structures of the ozone field that can only be represented in the model by increasing its resolution.

In order to assimilate small-scale information within the Météo-France MOCAGE CTM with a high resolution horizontal grid while keeping reasonable execution cost, we have developed a spectral version of the Cerfacs Valentina data assimilation system. We use the external loop algorithm in conjunction with the 3D-Var with FGAT variational method. We show that this combination deteriorates the analyses for atmospheric situations governed by rapid transport. As a consequence we choose to use the variational 4D-Var method in terms of increment to perform high resolution ozone simulations.

We use the Valentina system with the MOCAGE CTM both at low and high horizontal resolutions for the month of September 2008 during which small-scale structures are present in the ozone field at the vicinity of the Antarctic polar vortex. The total ozone columns from the IASI instrument have been assimilated because of their high spatial repartition. They have been averaged on the low and the high model grids giving two super-observation sets. We combine them with the profiles from the MLS instrument in order to constrain the vertical repartition of the information in the stratosphere and the upper troposphere during the data assimilation process.

The model resolution increase improves the CTMs direct simulations and, to a lesser extent, the analyses obtained from the assimilation of the low resolution data set. However, the increase of the super-observation resolution deteriorates the analyses at some vertical levels because the MLS data that constrain the vertical shape of the ozone profile are sparse compared to IASI data. We point out the need to have a source of information on the ozone vertical distribution as dense as the assimilated total columns, such as the information brought by the Averaging Kernels.

Keywords: atmospheric chemistry, ozone, variational data assimilation, *Metop-A*/IASI.

Introduction

Notre interprétation personnelle intervient toujours. Ce que nous disons que nous faisons est inévitablement modifié par notre propre compréhension et les limites de notre compréhension.

Extrait de *La ruche d'Hellstrom*,
Frank Herbert, écrivain de science-fiction américain.

Bien qu'étant un composant minoritaire de l'atmosphère, l'ozone joue un rôle important dans son équilibre radiatif et thermique. Dans la stratosphère, il absorbe le rayonnement solaire ultraviolet et assure un filtrage du rayonnement nocif pour les organismes vivants. Dans la haute troposphère, il participe à l'effet de serre du fait de ses propriétés d'absorption du rayonnement infrarouge terrestre. En 1985, le rôle destructeur des CFC, composés industriels très stables injectés par l'Homme dans la troposphère et transportés jusque dans la stratosphère où ils sont photodissociés, est observé en Antarctique au printemps austral avec le phénomène communément appelé le *trou d'ozone*. Ce phénomène exceptionnel révèle la fragilité de l'atmosphère et l'impact significatif des activités anthropiques sur son équilibre. La prise de conscience internationale eut pour conséquence l'interdiction de la production des CFC à la suite de la ratification en 1987 du protocole de Montréal par l'ensemble des pays industrialisés. Ainsi, la surveillance des concentrations d'ozone et la détermination de sa distribution spatio-temporelle sont des objectifs internationaux fondamentaux des programmes de recherche en chimie atmosphérique.

Cette surveillance de l'ozone atmosphérique s'opère notamment par le biais de mesures satellitaires et *in-situ* (aéroportées ou ballons-sondes). Les mesures effectuées à partir de l'espace permettent d'accéder à une cartographie de notre planète plus détaillée que les mesures *in-situ* et leur utilisation s'est intensifiée ces dernières décennies. Elles constituent un outil indispensable pour mieux comprendre les différences entre les variations du cycle naturel de l'ozone et l'appauvrissement de la couche d'ozone causé par les substances d'origine anthropique. Cependant, ces mesures spatiales restent limitées par leur géométrie et leur sensibilité, les empêchant de fournir de l'information sur l'ensemble de la surface terrestre à tout instant et sur toute la verticale de l'atmosphère. Afin d'estimer la distribution de l'ozone sur l'ensemble de l'atmosphère à chaque instant, on utilise des modèles numériques et, notamment, les modèles de chimie-transport, bien adaptés dans le cas de l'ozone stratosphérique. Ces modèles apportent une contribution fondamentale à l'étude de l'ozone atmosphérique en permettant d'intégrer les connaissances acquises, de tester les hypothèses sur le rôle des processus physico-chimiques et de suivre ainsi l'évolution de la couche d'ozone.

Dû à la complexité des phénomènes du système atmosphérique, les modèles numériques sont basés sur de nombreuses approximations. Notamment, la vitesse de destruction de l'ozone, le rôle de la chimie hétérogène ou encore la dilution du trou d'ozone vers les moyennes latitudes ne sont pas encore complètement maîtrisées. Afin d'estimer aussi précisément que possible l'état

atmosphérique, on peut combiner de manière optimale l'information provenant des observations avec les lois physiques régissant l'atmosphère prises en compte dans les modèles. Les techniques d'assimilation de données permettent cette combinaison en tenant compte de l'incertitude relative aux différentes sources d'information. Introduites relativement récemment en chimie atmosphérique (aux alentours de 1995), les techniques d'assimilation de données ont notamment été utilisées par la suite dans le cadre du projet européen ASSET afin, entre autres, d'étudier la quantité d'ozone dans la stratosphère. Ce projet associait notamment Météo-France et le Cerfacs pour mener des expériences d'assimilation chimique en combinant le coupleur Palm au modèle de chimie-transport MOCAGE. Ainsi naquit le système d'assimilation de données MOCAGE-Palm, aujourd'hui rebaptisé Valentina.

L'objectif de ce travail de thèse est d'améliorer les analyses du champ d'ozone issues du système d'assimilation de données Valentina par le biais de l'exploitation optimale de l'information provenant des instruments embarqués à bord de satellites. Ceux-ci sont en effet caractérisés d'une part par le nombre toujours grandissant d'observations qu'ils fournissent, et d'autre part par la résolution spatiale de plus en plus fine de ces observations (taille des pixels inférieure à 50 km) qui est bien inférieure à celle de la résolution horizontale couramment utilisée dans les modèles de chimie-transport en version globale dans le cadre de l'assimilation de données. Pour la plupart des applications récentes de MOCAGE, les grilles horizontales globales utilisées sont la grille Gaussienne T42 ou la grille régulière 2° par 2° (correspondant respectivement à des cellules d'environ $310 \times 310 \text{ km}^2$ ou $220 \times 220 \text{ km}^2$ à l'équateur). Afin d'assimiler de telles données, une méthode couramment utilisée consiste à les moyenniser de manière appropriée à l'intérieur d'une cellule du modèle durant une fenêtre temporelle donnée. Mais ce processus génère une perte d'information, pouvant par exemple lisser les gradients des champs physiques représentés par les observations ou empêcher la représentation de phénomènes locaux. Afin de limiter la perte d'informations résultant de la moyenne des observations, il est donc souhaitable d'augmenter la résolution du modèle, ce qui implique une augmentation du coût numérique de l'assimilation de données.

Le système d'assimilation Valentina offre la possibilité d'utiliser la méthode variationnelle 3D-Var avec FGAT. Cette méthode, qui se distingue de la méthode variationnelle 4D-Var en simplifiant la prise en compte de la chimie et de la dynamique atmosphérique lors du processus amenant au calcul du champ d'ozone analysé, est donc moins coûteuse. L'algorithme de la boucle externe consiste à itérer plusieurs fois le processus d'assimilation. Et en utilisant un modèle linéaire simplifié avec une résolution horizontale croissante à chaque itération de la boucle externe, ce que l'on appelle l'algorithme multi-échelles, on espère réduire considérablement le coût de l'assimilation de données. Bien qu'étant initialement conçu pour être couplé à la méthode 4D-Var en terme d'incrément, l'algorithme de la boucle externe peut aussi être couplé à la méthode 3D-Var avec FGAT.

Parmi les instruments de dernière génération, l'interféromètre IASI, embarqué sur le satellite *Metop-A*, fournit une cartographie complète de la Terre toutes les 12 h avec des empreintes de 12 km de diamètre au Nadir. L'instrument IASI fournit des données sur l'ensemble de la colonne atmosphérique, et avec une largeur de bande de mesure d'environ 2 200 km, cet instrument réalise un grand nombre de mesures chaque jour. Par exemple, durant le mois de septembre 2008, environ 245 000 colonnes totales d'ozone IASI sont disponibles chaque jour. Ses caractéristiques font donc de IASI un instrument à haute répartition spatiale dont nous souhaitons assimiler l'information de petite échelle. Sa sensibilité verticale est traduite à l'aide de fonctions de balayage, les *Averaging Kernels*, qui n'ont pas été prises en compte pour des raisons de coût numérique. Pour pallier l'absence de leur utilisation, les colonnes totales IASI peuvent être combinées aux profils d'un autre instrument. Les profils du sondeur MLS permettent par exemple de contraindre la

répartition verticale des colonnes totales issues de IASI dans la stratosphère et la haute troposphère.

Le plan de la thèse

La *première partie* a pour objectif de présenter le cadre général de cette thèse : la chimie atmosphérique. Une description introductive de l’atmosphère est fournie et quelques notions importantes, telles que la photochimie et le temps de vie d’une espèce, sont succinctement explicitées. Les phénomènes dynamiques à l’œuvre dans la stratosphère sont ensuite décrits car cette couche de l’atmosphère contient la majeure partie de l’ozone qui filtre les rayons ultraviolets du soleil. La chimie de l’ozone stratosphérique est détaillée puis nous décrivons la chimie atmosphérique vue depuis l’espace, notamment les caractéristiques des mesures issues des instruments IASI et MLS.

Majoritairement théorique, la *deuxième partie* est consacrée à la description des outils numériques nécessaires à la compréhension des études menées dans cette thèse. Elle débute par la description des méthodes d’assimilation de données. Le formalisme mathématique de ces méthodes, la façon dont les erreurs sont prises en compte ainsi que quelques méthodes variationnelles sont introduites. La modélisation de la chimie atmosphérique au sein du modèle de chimie-transport MOCAGE est ensuite explicitée. Enfin, les bases du système d’assimilation de données Valentina sont décrites.

La *troisième partie* détaille la mise en place du système d’assimilation haute résolution. Afin de réduire la dimension du problème d’assimilation de données, sa résolution est implémentée dans l’espace spectral. La méthodologie appliquée est développée, puis l’algorithme de la boucle externe est détaillé et la combinaison de l’algorithme de la boucle externe et de la méthode variationnelle 3D-Var avec FGAT est discutée. Cette combinaison pose problème dans le cas de situations atmosphériques dominées par le transport. Ce constat a incité à écrire un article à propos du comportement du système d’assimilation de données dans une telle configuration. Cet article, publié au journal *Monthly Weather Review*, est résumé et présenté. Cette partie est conclue en explicitant le choix d’utiliser la méthode variationnelle 4D-Var en terme d’incrément.

La *quatrième partie* introduit et résume un article en cours de soumission au journal *Atmospheric Chemistry and Physics*. Dans cet article, les colonnes totales d’ozone issues de l’instrument IASI sont moyennées sur deux grilles horizontales de résolutions différentes, combinées aux profils issus de l’instrument MLS, et les jeux de données obtenus sont assimilés au sein du modèle MOCAGE utilisé avec les résolutions horizontales choisies pour la moyenne des données IASI.

Enfin dans la *cinquième et dernière partie* de cette thèse, nous évoquons les futurs axes de recherche ouverts par cette thèse : d’une part, ceux envisageables pour la poursuite et l’approfondissement du travail réalisé ; et d’autre part, des aspects plus généraux de l’assimilation de données appliquée à la chimie atmosphérique.

Première partie

La chimie atmosphérique

Rien ne naît ni ne périt, mais des choses déjà existantes se combinent, puis se séparent à nouveau.

Anaxagore de Clazomènes, philosophe présocratique grec.

Depuis la formation de la Terre il y a plus de quatre milliards d'années, la composition chimique de l'atmosphère n'a cessé d'évoluer, comme le montre l'analyse des bulles d'air emprisonnées dans la glace polaire. L'atmosphère est un milieu complexe, dynamique et sensible qui est régi par des phénomènes physiques et chimiques. Elle se trouve dans des conditions éloignées de l'équilibre thermodynamique. Son maintien dans ces conditions résulte d'une part de processus naturels tels que les émissions volcaniques, les éclairs et le bombardement de particules solaires, mais aussi directement de la présence sur Terre de la vie sous des formes diverses. Les émissions de nombreux composés chimiques par la végétation et les sols et le dépôt sur la surface de certaines espèces réactives montrent le rôle fondamental joué par la biosphère dans les bilans chimiques de l'atmosphère.

L'intérêt de certains scientifiques à l'égard de la chimie atmosphérique remonte à la seconde moitié du XVIII^e siècle. Des chimistes tels que Joseph Priestley, Antoine Lavoisier et Henry Cavendish réalisèrent les premières mesures de la composition chimique de l'atmosphère, notamment de l'oxygène, du dioxyde de carbone et de l'azote. Au XIX^e siècle et au début du XX^e siècle, l'intérêt des scientifiques se reporte sur les espèces traces (espèces ayant de très faibles concentrations dans l'atmosphère). On peut approximativement faire débiter l'histoire de l'étude de la chimie atmosphérique avec l'identification de l'**ozone** par Christian Friedrich Schönbein en 1840 et l'écriture de *Air and Acid Rain* par Robert Angus Smith en 1872. Au XX^e siècle, les sciences atmosphériques s'intéressent à l'étude de la composition de l'atmosphère du point de vue du changement de concentration des espèces traces au fil du temps et des processus chimiques impliqués dans la création et la destruction des composés atmosphériques. De ces recherches, on peut citer deux résultats importants que sont l'explication donnée par Sydney Chapman et Gordon Dobson concernant la façon dont la couche d'ozone est créée et maintenue, et l'explication du *smog* photochimique par Arie Jan Haagen-Smit.

L'intérêt pour la chimie atmosphérique prend de l'ampleur dans les années 1970. En effet, avec l'avènement de l'aviation supersonique, des scientifiques s'inquiètent de l'éventualité d'une destruction de la couche d'ozone stratosphérique par les émissions en haute altitude des oxydes d'azote. Les recherches initiées à cette époque démontrent le contraire, mais mettent en évidence le rôle destructeur des chlorofluorocarbures (CFC), composés industriels très stables injectés par l'Homme dans la troposphère et transportés jusque dans la stratosphère où ils sont photodissociés (MOLINA ET ROWLAND [75]). En 1985, les premiers signes des effets des CFC sont observés en Antarctique durant le printemps austral, conduisant à ce que l'on appelle communément le **trou d'ozone** (FARMAN *et al.* [29]). À travers cet exemple, on constate que les rapports entre les émissions et les dépôts des composés chimiques de l'atmosphère sont aujourd'hui fortement perturbés par l'activité humaine. Les émissions résultant des processus industriels et des pratiques agricoles sont tout particulièrement responsables de ces changements. D'où le terme d'*anthropocène*, désignant une nouvelle ère géologique putative caractérisée par l'influence de l'Homme depuis les années 1850 sur l'écosphère terrestre, introduit par le prix nobel de chimie Paul Crutzen dans les années 1990.

De nombreux ouvrages traitent de la chimie atmosphérique de manière plus ou moins complète et didactique. L'état de l'art que nous dressons dans la première partie de cette thèse est en partie basé sur le livre de DELMAS *et al.* [22]. Nous débutons par une description introductive de l'atmosphère : de sa composition chimique ainsi que de sa structure verticale. Puis on explicite

succinctement la photochimie, phénomène ayant lieu dans l'atmosphère, et l'importante notion de temps vie des espèces chimiques. Dans le second chapitre, nous décrivons les phénomènes dynamiques à l'œuvre dans la stratosphère. Cette couche de l'atmosphère revêt un intérêt particulier puisqu'elle contient la majeure partie de l'ozone. Cette espèce chimique filtre les rayons ultraviolets (UV) provenant du soleil et est ainsi nécessaire au développement de la vie sur Terre. La chimie de l'ozone stratosphérique est décrite dans le troisième chapitre. De nos jours, de nombreux instruments embarqués à bord de satellites réalisent des mesures de la composition atmosphérique depuis l'espace et dans le quatrième et dernier chapitre de cette partie, nous décrivons les caractéristiques de ces mesures satellitaires. Ces mesures donnent de précieuses informations qu'il est possible de combiner, par des méthodes d'assimilation de données par exemple, avec un modèle numérique afin de fournir des analyses spatio-temporelles continues des concentrations atmosphériques de meilleure qualité. L'assimilation de données, technique dont la théorie est fournie dans la partie II de cette thèse, constitue le cœur de ce travail de thèse. En conséquence, nous décrivons plus en détail les caractéristiques de deux instruments spatiaux qui ont fourni les mesures d'ozone que nous avons assimilées.

1

Description de l'atmosphère

La formation de l'atmosphère est directement liée à l'évolution de la Terre dans son ensemble. L'environnement terrestre peut être divisé en plusieurs enveloppes (aussi appelées sphères) considérées comme des réservoirs de matières entre lesquels ont lieu des échanges. Ces enveloppes sont :

- l'atmosphère, dominée par la phase gazeuse ; on y distingue la troposphère et la stratosphère, qui contiennent 99 % de la masse de l'atmosphère, la mésosphère, et la thermosphère ;
- l'hydrosphère (phase liquide) : océan et eaux continentales ;
- la cryosphère (phase solide sous forme de glace) : calottes glaciaires, glace de mer et glaciers de montagne ;
- la biosphère : ensemble des organismes vivants ;
- la lithosphère : partie minérale originelle ;
- la pédosphère (les sols) : interface entre la lithosphère, la biosphère et l'atmosphère.

La composition chimique de l'atmosphère résulte des échanges continus de matière entre les différentes sphères de l'environnement mais aussi du paramètre externe essentiel qu'est le rayonnement solaire. La FIG. I.1.1 décrit de manière schématique les différents processus intervenant dans la composition chimique de l'atmosphère. Ces processus peuvent se classer en trois mécanismes : les mécanismes d'émissions tels que le volcanisme, les mécanismes de dépôts tels que le lessivage par les eaux de pluie et enfin les mécanismes de transformation tels que les réactions chimiques et photochimiques. Le cycle émission/transformation/dépôt permet d'expliquer comment sont émis les constituants chimiques à la surface des océans et des continents, comment ils évoluent dans l'atmosphère et comment ils sont éliminés de l'atmosphère pour être recyclés dans les autres réservoirs de l'environnement. Ainsi l'enveloppe gazeuse de la Terre que constitue l'atmosphère peut être considérée comme un réacteur chimique tridimensionnel fortement affecté par les phénomènes internes de diffusion turbulente et de transport ainsi que par le rayonnement solaire.

Pour comprendre la distribution des constituants chimiques de l'atmosphère, il est donc nécessaire de posséder quelques notions de dynamique, de rayonnement, de chimie et de photochimie. Ce chapitre constitue une introduction à la chimie atmosphérique. Nous détaillons dans une première section la composition de l'atmosphère du point de vue de ses espèces gazeuses et de sa structure verticale. Puis dans une seconde section, nous fournissons deux notions utiles à la compréhension des phénomènes étudiés dans cette thèse : la photochimie et le temps de

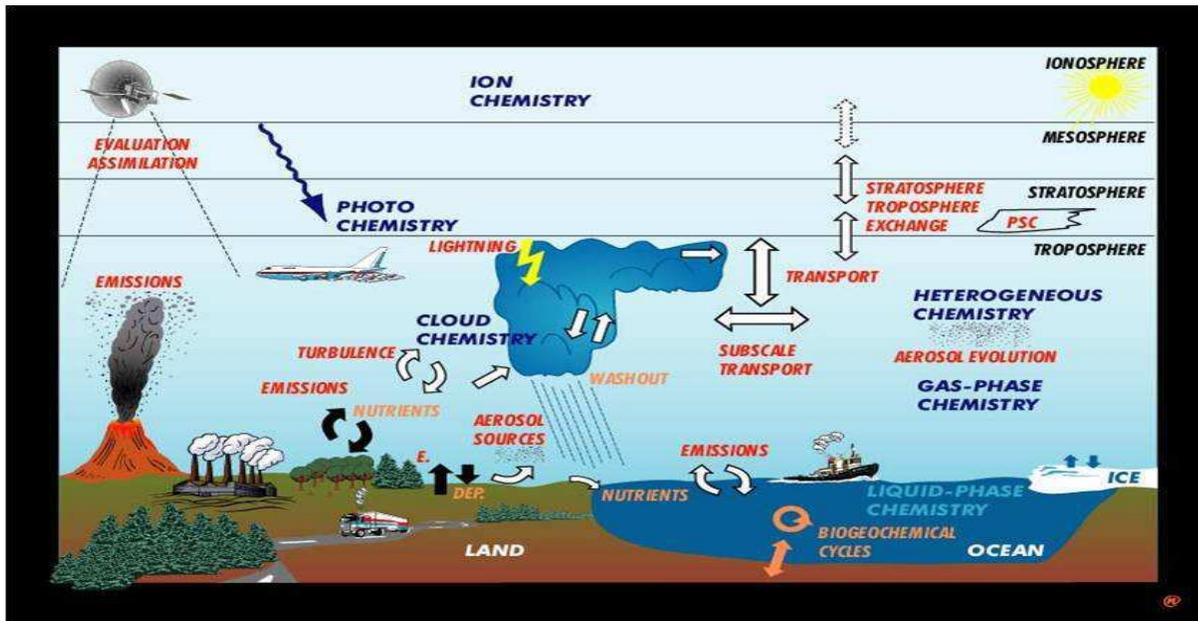


Fig. I.1.1 : Représentation schématique des principaux processus de la chimie atmosphérique. La ionosphère comprend la thermosphère et l'exosphère. Extrait de FLEMMING [31].

vie d'une espèce chimique. La notion de temps de vie illustre la compétition entre la production/destruction photochimique et les phénomènes de transport dont dépend la distribution des composés chimiques.

1.1 Composition de l'atmosphère

1.1.1 Les espèces gazeuses dans l'atmosphère

La composition chimique de l'atmosphère actuelle est donnée dans la FIG. I.1.2 par ordre de grandeur des concentrations. Les constituants majeurs de l'atmosphère sont l'azote ($\approx 78\%$) et le dioxygène ($\approx 21\%$), les pourcentages étant exprimés en volume par rapport à l'air sec. La vapeur d'eau est le troisième constituant de l'air atmosphérique (son pourcentage, inférieur à 1% , est variable). Les gaz rares (argon, néon et hélium) sont chimiquement inertes et n'interviennent pas dans les mécanismes influençant la composition chimique de l'atmosphère. Le dioxyde de carbone joue un rôle particulier, car il intervient dans le phénomène de photosynthèse qui est le moteur de la biosphère. Les autres constituants gazeux sont ceux que l'on appelle les **constituants mineurs** de l'atmosphère (ou gaz trace), dont la concentration varie de quelques ppm (10^{-6} mole.mole $^{-1}$ d'air) à quelques dizaines de ppt (10^{-12} mole.mole $^{-1}$ d'air).

Les constituants mineurs sont en concentrations infimes. Cependant ces concentrations importent car les transformations chimiques sont non-linéaires et de petites concentrations peuvent signifier une haute réactivité. Actuellement, certains de ces constituants mineurs subissent des augmentations importantes de concentration provoquées par diverses activités humaines. Et, bien qu'émis majoritairement à la surface terrestre, les mouvements qui animent l'atmosphère transportent ces constituants mineurs de l'atmosphère sur l'ensemble de la planète. Ainsi leur rôle dans l'environnement terrestre peut devenir considérable car :

- ils influent sur le bilan radiatif de la Terre (gaz à effet de serre, aérosols) ;

- ils influent sur la "qualité chimique" de l'air atmosphérique et des précipitations, notamment sur l'acidité et la capacité oxydante ;
- à "forte concentration", ils peuvent être toxiques pour tous les êtres vivants.

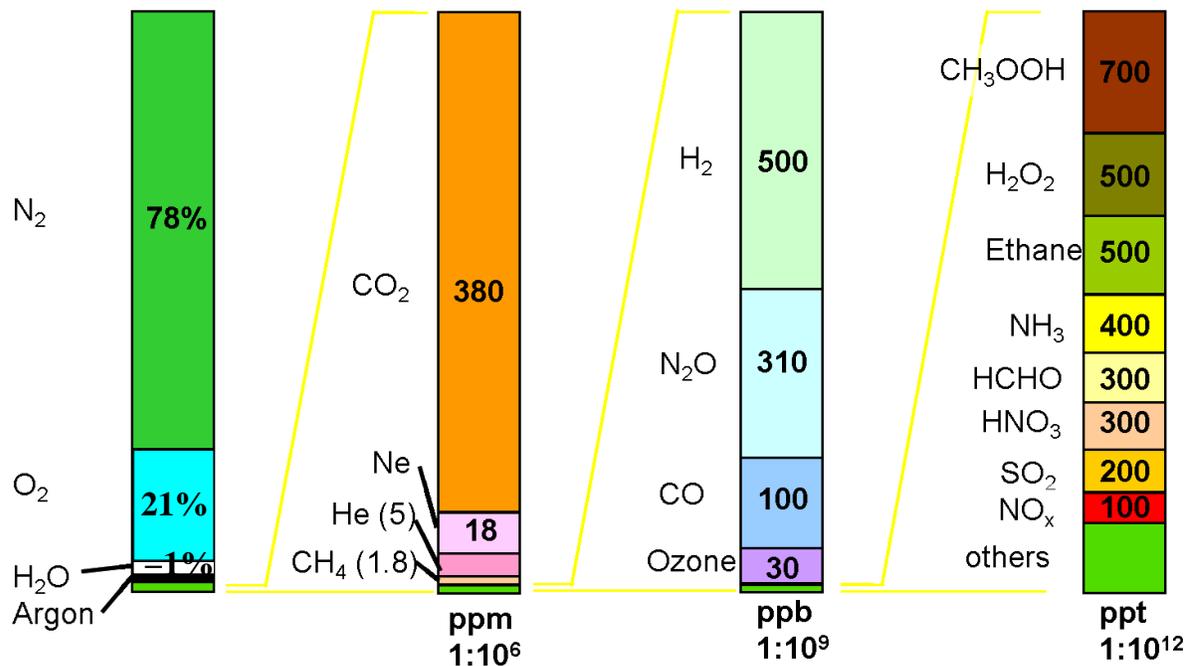


Fig. I.1.2 : Principaux constituants chimiques gazeux de l'atmosphère classés par ordre de grandeur de leurs concentrations. Extrait de FLEMMING [31].

On peut distinguer les espèces gazeuses par trois de leurs propriétés détaillées ci-après.

Les gaz à effet de serre

Les gaz à effet de serre sont caractérisés par leur capacité d'absorption du rayonnement infrarouge (IR) et donc par une influence sur le bilan radiatif terrestre. Outre le CO₂ et la vapeur d'eau, on distingue :

- le méthane (CH₄) ;
- le protoxyde d'azote (N₂O) ;
- l'ozone (O₃) ;
- les chlorofluorocarbures (CFC) et les hydrochlorofluorocarbures (HCFC) qui, à l'exception du chlorure de méthyl (CH₃Cl), sont exclusivement d'origine anthropique.

Les gaz réactifs

Les gaz réactifs sont essentiellement des dérivés du carbone, de l'azote et du soufre. Certains de ces gaz réactifs (oxyde d'azote, méthane, monoxyde de carbone, hydrocarbures non méthaniques) contribuent à la formation photochimique de l'ozone. Ces constituants s'oxydent dans l'atmosphère pour donner des acides qui, en phase gazeuse ou liquide, déterminent le caractère acide de l'air et des précipitations.

Les oxydants

On trouve les oxydants dans l'atmosphère sous forme atomique et moléculaire (ozone, peroxy-acetyl-nitrate, etc...) ou radicalaire (OH, HO₂, RO₂, NO₃, etc...) à très courte durée de vie. Ces derniers, notamment le radical hydroxide (OH), sont les principaux agents des transformations photochimiques dans l'atmosphère. Leurs concentrations sont infinitésimales, mais leur taux de production peut être très élevé.

1.1.2 La structure verticale de l'atmosphère

Les couches atmosphériques

L'atmosphère terrestre est généralement représentée par une structure en couches, telle que représentée sur la FIG. I.1.3, qui dérive de ses caractéristiques thermiques. La première couche rencontrée depuis la surface est la **troposphère**, au sein de laquelle la température moyenne décroît régulièrement avec l'altitude jusqu'à un minimum qui définit la **tropopause**. Cette couche représente 90 % de la masse totale de l'atmosphère. C'est la couche où se déroulent les phénomènes météorologiques. L'épaisseur de la troposphère est variable selon le lieu, la saison et la nature des masses d'air caractérisant la situation météorologique du moment. Elle varie en moyenne de 7 km aux pôles à 17 km à l'équateur, les températures à la tropopause prenant alors respectivement, en moyenne, les valeurs de -45° C et -75° C. La partie la plus basse de la troposphère, où le frottement avec le relief terrestre influence les écoulements atmosphériques, est appelée la **couche limite** et le reste de la troposphère, du sommet de la couche limite à la tropopause donc, est appelé la **troposphère libre**.

Au-dessus de la tropopause se situe la **stratosphère** dans laquelle la température croît progressivement avec l'altitude pour atteindre la valeur maximale d'environ 0° C à la **stratopause**, vers 50 km d'altitude. L'augmentation de la température dans cette couche résulte d'un effet radiatif d'absorption des rayons UV par l'ozone contenu en forte proportion, ainsi appelée **couche d'ozone**. Dans la stratosphère, il y a peu de mouvements verticaux des masses d'air et ces masses d'air sont disposées en strates, d'où le nom de cette couche.

Au-delà de 50 km d'altitude, la température décroît à nouveau dans la **mésosphère** jusqu'à une autre discontinuité, la mésopause, vers 80 km. Celle-ci marque approximativement la fin de l'homosphère, constituée des trois premières couches ayant le même caractère hydrodynamique, et le début de l'hétérosphère. Dans l'homosphère, les composés fondamentaux O₂ et N₂ sont en mélange et, par conséquent, la masse moléculaire moyenne de l'air ne varie pratiquement pas avec l'altitude. Les principales espèces optiquement actives y sont l'ozone, le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau.

La thermosphère, située au-dessus de la mésopause, voit sa température augmenter rapidement, du fait de l'absorption du rayonnement solaire de courte longueur d'onde, jusqu'à une altitude de 600 km où est généralement défini le sommet de l'atmosphère. La température dans la thermosphère dépend beaucoup de l'activité solaire et peut atteindre des valeurs très élevées (de 300° C à 1600° C). De plus, les conditions chimiques et photochimiques sont progressivement modifiées par rapport à celles de l'homosphère car l'oxygène atomique devient un constituant prépondérant. La masse moléculaire varie alors avec l'altitude car, dans l'hétérosphère, les gaz sont séparés selon leur masse moléculaire.

L'**atmosphère moyenne** est définie comme étant la région s'étendant de la tropopause à l'homopause (approximativement de 10 à 100 km d'altitude). Moins accessible aux observations *in-situ*, cette région n'a été étudiée systématiquement que depuis une trentaine d'années. Elle est particulièrement vulnérable aux perturbations extérieures que sont l'activité solaire, les émissions

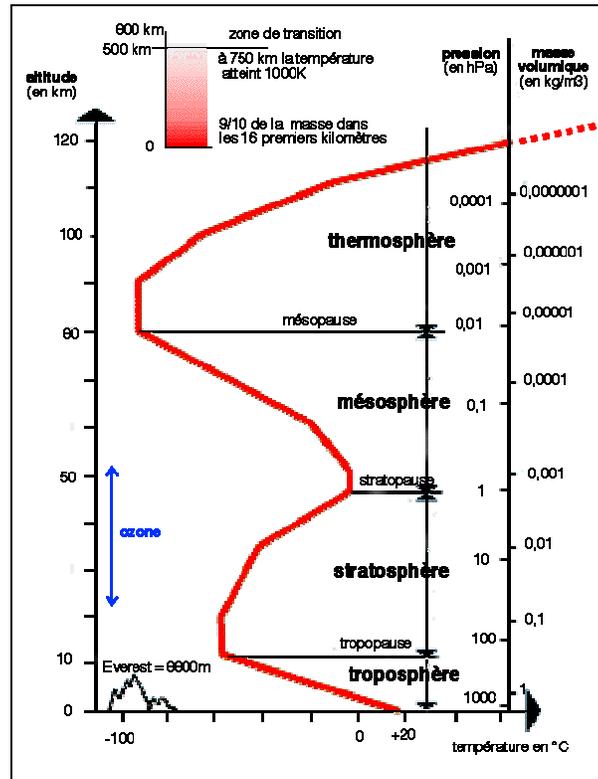


Fig. I.1.3 : Structure thermique verticale moyenne de l'atmosphère. L'échelle verticale est donnée pour l'altitude en km avec une équivalence moyenne pour la pression en hPa et pour la masse volumique en kg/m^3 .

anthropiques ou les éruptions volcaniques. Les études menées dans le cadre de cette thèse se situent dans cette portion de l'atmosphère.

Distribution verticale des constituants atmosphériques gazeux

La distribution verticale des constituants atmosphériques gazeux dépend majoritairement de leur durée de vie (notion détaillée dans la section suivante). Ainsi, comme l'illustre le bas de la FIG. I.1.4, les distributions verticales relatives (en volume de gaz par rapport au volume d'air sec) sont homogènes pour les gaz à longue durée de vie tels que le diazote N_2 et le dioxygène O_2 . Pour les constituants à courte durée de vie comme les NO_x et les composés organiques volatils (COV), elles sont très inhomogènes, avec en général de fortes concentrations à proximité des sources d'émission.

Les distributions verticales absolues (en nombre de molécules par unité de volume) obéissent à la loi des gaz parfaits. Comme l'illustre le haut de la FIG. I.1.4, les profils verticaux de concentrations absolues des différents gaz à longue durée de vie varient approximativement de façon logarithmique (relation quasi-linéaire entre l'altitude et le logarithme de la concentration). La distribution de la vapeur d'eau est différente en raison de la dépendance de sa concentration à la température. De même, la distribution de l'ozone est différente, mais en raison de la localisation de sa source principale dans la stratosphère.

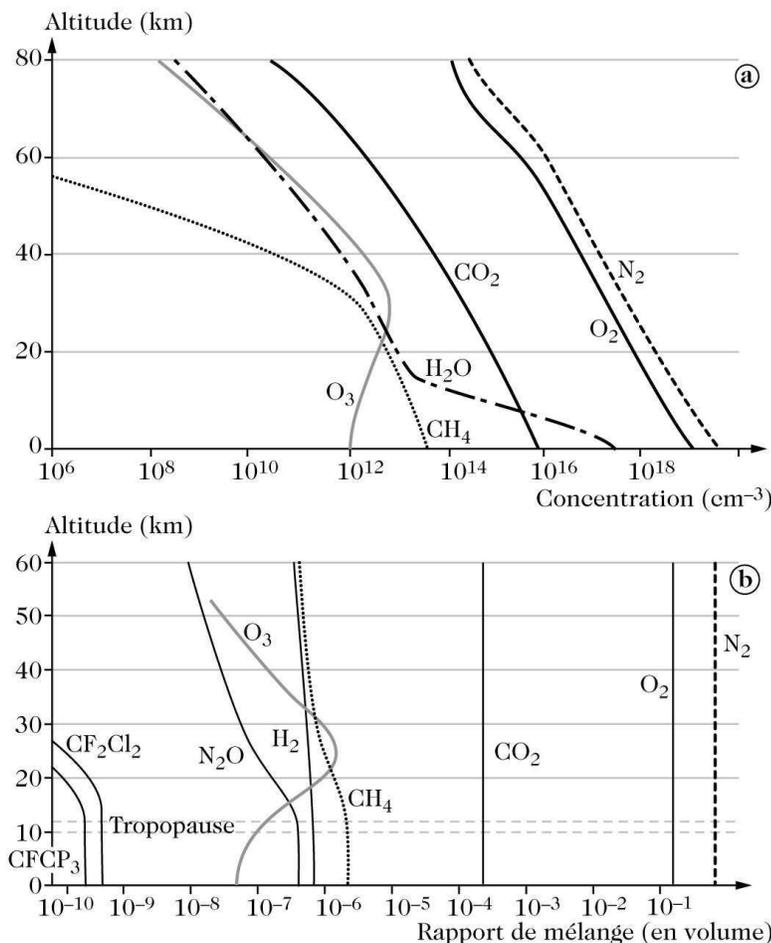


Fig. I.1.4 : Distribution verticale (a : concentrations en molécules. cm^{-3} ; b : rapport de mélange) des principales espèces gazeuses atmosphériques. Extrait de MÉGIE [76].

1.2 Notions utiles

1.2.1 La photochimie

Électromagnétisme

Le rayonnement électromagnétique solaire est un vecteur important de transfert d'énergie dans l'atmosphère. Il initie les réactions photochimiques. L'émission ou l'absorption de rayonnement par la matière, composée d'atomes et de molécules, correspondent à une transition entre deux niveaux énergétiques donnés (la longueur d'onde étant reliée à la différence d'énergie de la transition). Les énergies associées aux transitions électroniques étant assez élevées, de l'ordre de quelques électron-volts, elles correspondent à un rayonnement d'onde UV ou visible. En pratique, lors d'une transition électronique, se produisent également des transitions de vibration et de rotation. Les transitions vibrationnelles sont provoquées par un rayonnement nettement moins énergétique situé dans le proche IR (longueur d'onde $\lambda \approx 10 \mu\text{m}$). Pour les états rotationnels, les énergies mises en jeu sont encore plus faibles puisqu'ils sont provoqués par des rayonnements situés dans le lointain IR et les micro-ondes ($\lambda \approx 10 \text{mm}$).

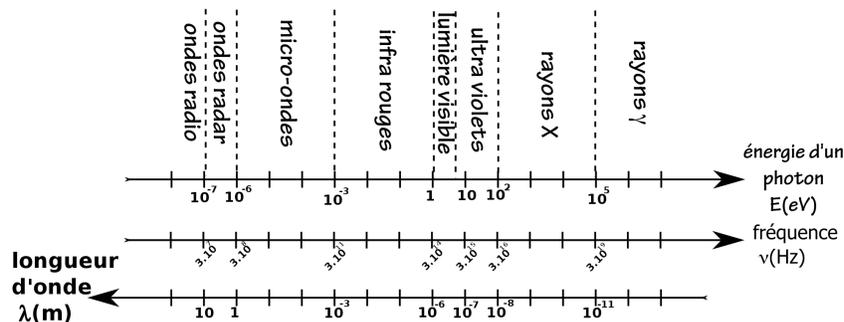


Fig. I.1.5 : Domaines du spectre électromagnétique solaire en fonction de la longueur d'onde, de la fréquence et de l'énergie des photons.

Le spectre électromagnétique solaire est représenté sur la FIG. I.1.5. Il couvre les domaines des rayons gamma à celui des ondes radio. Les échanges d'énergie dans l'atmosphère sont dominés par les rayonnements UV, visible et IR. En télédétection de l'atmosphère et de la surface, les instruments mesurent des bandes d'absorption particulières des radiations. Par exemple, l'instrument IASI, que nous avons utilisé dans cette thèse, mesure dans le domaine de l'IR. Notons que le rayonnement micro-onde, bien qu'étant négligeable dans le bilan énergétique, est aussi utile pour la télédétection. Et notamment, l'instrument MLS, également utilisé dans cette thèse, mesure dans le domaine micro-onde. Il est intéressant de posséder des données issues de différents domaines du spectre électromagnétique solaire car leurs caractéristiques et les informations qu'elles fournissent sont différentes.

Réactions photochimiques

Les réactions en phase gazeuse entre deux molécules stables sont quasi-impossibles dans l'atmosphère car elles mettent en jeu une énergie d'activation trop importante ($80 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$). Seules les réactions dont l'énergie d'activation est inférieure à quelques dizaines de $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ sont probables dans l'atmosphère. Les réactions faisant intervenir une ou deux espèces radicalaires ayant des énergies d'activation plus faibles (de 0 à $60 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$), elles sont pratiquement les seules possibles.

Les réactions photochimiques sont amorcées par l'absorption d'un photon, de fréquence ν , par une molécule AB qui passe alors dans un état électronique excité AB^* . La molécule quitte cet état, en général instable, par différents processus physiques et chimiques comme par exemple la luminescence, le *quenching*, l'ionisation ou, en particulier, la photolyse. La photolyse, ou photodissociation, induit la rupture de liaison chimique suivant la réaction : $AB^* \rightarrow A + B$, et fournit ainsi la majorité des radicaux dans l'atmosphère. La **photochimie** (WAYNE ET WAYNE [102]) joue donc un rôle crucial dans la chimie atmosphérique en permettant d'initier les transformations en phase gazeuse.

Vitesse des réactions de photolyse

Si C_{ab} est la concentration de l'espèce AB, la vitesse v de la photolyse est définie par :

$$v = \frac{dC_{ab}}{dt} = J_{ab} \times C_{ab}. \quad (\text{I.1.1})$$

La constante de photodissociation, J_{ab} (en s^{-1}), est aussi appelée fréquence de photolyse. Elle dépend de nombreux facteurs, notamment de l'intensité du rayonnement solaire, de l'efficacité

d'absorption du rayonnement par la molécule AB et du rendement quantique primaire de photolyse (rapport du nombre de molécules AB* au nombre total de photons absorbés).

Cette grandeur, propre à l'espèce chimique considérée et variant dans l'espace et le temps, est calculée dans certains modèles numériques par l'intégrale :

$$J_{ab}(z, \gamma) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F(z, \lambda, \gamma) \sigma_{ab}(\lambda) \phi_{ab}(\lambda) d\lambda, \quad (\text{I.1.2})$$

où $F(z, \lambda, \gamma)$, en $\text{photon.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}.\text{nm}^{-1}$ (si λ est exprimé en nm), est le flux de rayonnement solaire (flux actinique ou flux sphérique) dans le domaine de longueurs d'onde allant de λ à $\lambda+d\lambda$, $\sigma_{ab}(\lambda)$, en $\text{cm}^2.\text{molécule}^{-1}$, la section efficace d'absorption du constituant à la longueur d'onde λ , $\phi_{ab}(\lambda)$, en $\text{molécule.photon}^{-1}$, le rendement quantique primaire de photolyse du constituant, γ l'angle zénithal et z l'altitude. L'intégrale est calculée sur le domaine $[\lambda_1, \lambda_2]$ qui définit les longueurs d'onde entraînant la photodissociation. Les sections efficaces d'absorption σ et les rendements quantiques ϕ sont déterminés en laboratoire. Dans la plupart des cas, ces quantités dépendent principalement de la température. Le flux actinique F , quant à lui, varie fortement avec l'altitude, l'angle zénithal et la couverture nuageuse.

La photolyse est nécessaire à l'existence de l'ozone. En effet, le dioxygène est photodissocié en oxygène atomique qui, en se recomposant avec d'autres molécules de dioxygène, va former de l'ozone. Parallèlement, l'ozone peut être détruit par photolyse. L'ozone a une énergie de photodissociation faible qui permet, en théorie, sa photodissociation en O et O₂ pour toutes les longueurs d'onde inférieures à 1.14 μm . En fonction de la longueur d'onde du photon incident, l'atome d'oxygène produit se trouve dans un état excité, de manière temporaire, ou dans son état fondamental.

1.2.2 Le temps de vie d'une espèce chimique

Définition

Le **temps de vie** τ d'une espèce chimique est défini comme le temps "moyen" durant lequel une molécule réside dans le volume d'air considéré. Il est aussi communément appelé temps de résidence. Pour un constituant atmosphérique donné, son temps de résidence dans l'atmosphère est conditionné par son taux de perte (ou de disparition) effectif qui varie dans le temps et dans l'espace. Le terme de perte d'un composé du volume considéré peut être dû, entre autres, aux processus de dépôt à la surface, aux réactions chimiques, à la sédimentation gravitationnelle, au transport, aux échanges avec l'océan ou encore au lessivage. Si C est la concentration d'un constituant chimique, son temps de vie τ est déterminé par :

$$\tau = \frac{C}{-(\frac{\partial C}{\partial t})_{\text{perte}}} = \frac{1}{\sum_i \tau_i^{-1}}, \quad (\text{I.1.3})$$

où chaque τ_i représente le temps de vie du constituant défini par un processus spécifique. Ainsi le temps de vie global τ s'exprime en fonction des différents temps de vie individuels.

Cette notion de temps de vie est extrêmement utile pour les études atmosphériques. Elle permet notamment de considérer quel est le phénomène majeur contrôlant la distribution d'une espèce. Dans le cadre de l'atmosphère moyenne, nous considérons essentiellement les phénomènes chimiques et dynamiques. Si le **temps de vie chimique** τ_{ch} peut être déduit du taux de destruction de l'espèce considérée, le **temps de vie dynamique** τ_{dyn} , ou temps caractéristique de transport, est plus délicat à évaluer.

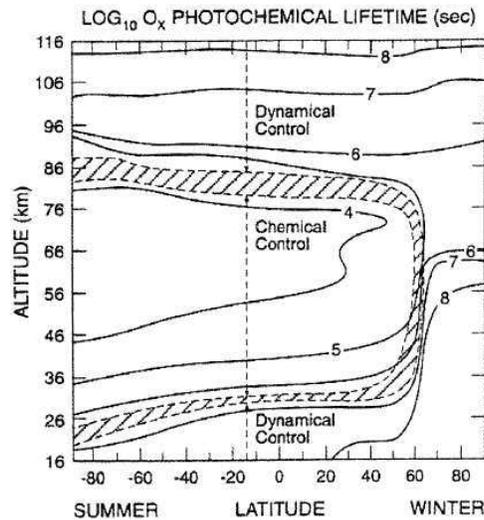


Fig. I.1.6 : Temps de vie photochimique de la famille O_x : la figure représente $\log_{10}(\tau_{O_x})$, avec τ_{O_x} le temps de vie photochimique en secondes. Dans la zone hachurée, la distribution de O_x est contrôlée autant par le transport que par la photochimie. Extrait de BRASSEUR *et al.* [6].

Une illustration du temps de vie photochimique des molécules de la famille des O_x sur une coupe méridienne, telle qu'illustrée sur la FIG. I.1.6, a été proposée par BRASSEUR *et al.* [6]. Leur durée de vie photochimique est très variable, allant de quelques jours à plusieurs mois. Par exemple, en présence de soleil, le temps de vie des O_x est inférieur à un mois au-dessus de 30 km pour décroître jusqu'à la durée du jour vers 40 km et à quelques heures vers 70 km.

Temps caractéristiques de transport

Les temps caractéristiques d'échanges horizontaux et verticaux sont directement fonction des processus de transport atmosphérique. Ce transport, généré par les mouvements de l'air, possède trois origines :

- l'instabilité thermique verticale de l'atmosphère ;
- le mouvement de rotation de la Terre sur son axe ;
- l'inhomogénéité de la distribution de l'énergie externe (énergie solaire), avec un maximum dans la ceinture équatoriale et un minimum au niveau des pôles.

Ces facteurs provoquent des déséquilibres dynamiques et thermodynamiques qui engendrent la circulation atmosphérique.

Les temps caractéristiques moyens de transport sont schématisés sur la FIG. I.1.7 sur l'horizontale (à gauche) et la verticale (à droite). Le mélange de l'air dans le sens zonal (le long d'un cercle de latitude) varie avec la latitude et l'altitude. Le transport continental est de l'ordre de la semaine, le transport intercontinental de l'ordre de 2 semaines et le transport à l'intérieur d'un hémisphère de l'ordre de 1 à 2 mois. Le mouvement méridien est organisé en cellules (il est couplé au mouvement vertical) et le transport interhémisphérique dure environ une année.

Les échanges verticaux entre la stratosphère et la troposphère sont faibles en raison de la présence de la tropopause, véritable barrière dynamique du fait de l'inversion de température. Néanmoins ils existent à toutes les latitudes et leur durée caractéristique est de l'ordre de plusieurs années. Les échanges verticaux au sein de la stratosphère sont faibles, alors qu'ils sont plus importants au sein de la troposphère.

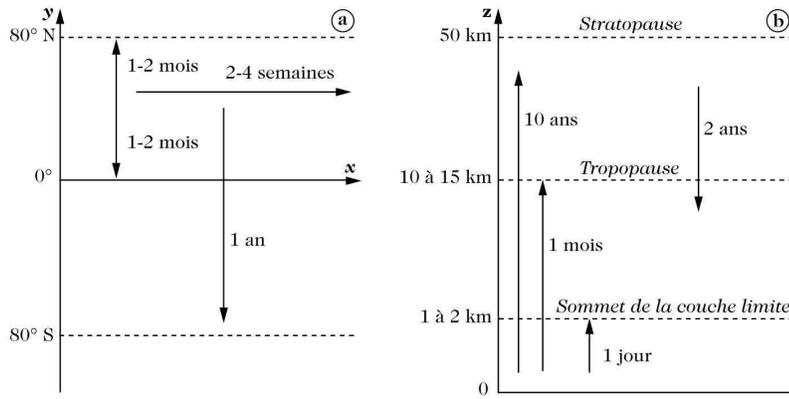


Fig. I.1.7 : Temps caractéristiques moyens de transport des constituants chimiques dans l'atmosphère (a) horizontaux, (b) verticaux. Extrait de JACOB [46].

Variabilité des échelles spatiales et temporelles

La comparaison du temps de vie chimique τ_{ch} et du temps de vie associé aux effets de la dynamique τ_{dyn} apporte de précieuses informations sur les processus contrôlant la variabilité spatiale et temporelle des concentrations des espèces atmosphériques. Cette comparaison est maintenant explicitée pour ses trois cas de figure.

Si $\tau_{ch} \ll \tau_{dyn}$, les espèces considérées sont en équilibre photochimique et les effets directs du transport sont secondaires. De forts gradients spatiaux caractérisent alors en général les distributions d'espèces contrôlées par la photochimie. Par exemple, entre 40 km et la stratopause, le temps de vie photochimique de l'ozone est court, de l'ordre de quelques jours à quelques heures. Le transport a donc peu d'influence sur la distribution de l'ozone qui est en équilibre photochimique. Cependant, la dynamique peut jouer un rôle important de manière indirecte par des effets thermiques ou par des couplages entre espèces chimiques. En effet, une espèce à très courte durée de vie, de la famille des HO_x par exemple, peut réagir avec une espèce à longue durée de vie, H_2O par exemple, qui dépend alors du transport. Dans ce cas, la dynamique influence indirectement la distribution de l'espèce à très courte durée de vie.

Si $\tau_{ch} \gg \tau_{dyn}$, la dynamique va réduire les gradients dans la distribution des composés chimiques à très longue durée de vie comme O_2 et N_2 dans l'atmosphère moyenne. Entre la tropopause et 30 km, le temps de vie photochimique de l'ozone est relativement long, de quelques jours à plusieurs mois, et le contrôle de l'ozone est alors dynamique. Le rapport de mélange de cette espèce va donc être relativement uniforme selon les latitudes et peu sensible aux variations du vent zonal.

Si $\tau_{ch} \approx \tau_{dyn}$, les distributions dépendent alors de la chimie et de la dynamique. Alors que la chimie tend à créer les gradients de rapport de mélange, les phénomènes de transport tendent à les réduire. Par exemple, dans la zone intermédiaire (représentée par la zone hachurée de la FIG. I.1.6), la photochimie et la dynamique sont couplées et la distribution de l'ozone devient plus complexe à représenter.

2

Dynamique stratosphérique

La dynamique atmosphérique traite des mouvements de l'atmosphère terrestre et établit les lois physiques qui les gouvernent. Ces lois constituent un ensemble de contraintes auxquelles sont soumis les mouvements, capables de transporter des propriétés physiques ou chimiques d'un point à l'autre de l'atmosphère, comme, par exemple, les mouvements liés à la convection. En l'absence de transport, la composition chimique de l'atmosphère tendrait vers un équilibre photochimique, où production et destruction locales des espèces s'équilibreraient. Cependant, les constantes de temps qui caractérisent les réactions chimiques sont en partie déterminées par la distribution de la pression et de la température, elles-mêmes soumises aux lois de la dynamique atmosphérique. Et en retour, la distribution des différents constituants atmosphériques et leurs caractéristiques radiatives ont un impact sur la dynamique atmosphérique. La dynamique joue ainsi un rôle majeur dans la distribution des espèces chimiques dans l'atmosphère.

Les mouvements atmosphériques sont gouvernés par trois forces principales : la gravité (sur la verticale), la force de gradient de pression et la force de Coriolis (due à la rotation de la Terre, elle s'oppose aux déplacements méridiens). Il en résulte des mouvements d'échelles spatio-temporelles variées au sein de l'atmosphère :

- la micro-échelle, d'extension horizontale typique inférieure au kilomètre et temporelle de l'ordre de la minute ;
- l'échelle convective, d'extension horizontale typique de 1 à 10 km et temporelle de l'ordre de l'heure ;
- la méso-échelle, d'extension horizontale typique de 10 à 100 km et temporelle de quelques heures ;
- l'**échelle synoptique**, qui concerne les systèmes dynamiques d'extension horizontale de l'ordre de 1000 km, de durée de vie de quelques jours ;
- et la plus étendue, l'échelle planétaire ou échelle globale, d'échelle horizontale typique de 10000 km.

Découverte il y a une centaine d'années par Teissenrenck de Bort, la stratosphère a fait l'objet de nombreuses études. Nous nous intéressons à cette couche atmosphérique puisqu'elle contient la majeure partie de l'ozone atmosphérique. Les mouvements des masses d'air y sont majoritairement d'échelle synoptique et planétaire. Nous décrivons dans une première section la circulation stratosphérique générale qui est illustrée pour le mois de juillet. Cette circulation résulte principalement de la structure thermique de la stratosphère qui fait d'elle un milieu plus stable que la troposphère. En effet, la stratosphère est caractérisée par une stratification de ses

masses d'air et cette stratification inhibe les mouvements verticaux qui sont de faible amplitude alors que les vents horizontaux peuvent être rapides.

Dans une seconde section, nous nous intéressons à des événements dynamiques particuliers. Le premier décrit est le vortex polaire qui apparaît dans l'hémisphère d'hiver. Ce tourbillon de grande taille, qui résulte de l'échauffement stratosphérique dû à l'ozone, est le lieu de phénomènes physico-chimiques qui conduisent à la perte de l'ozone. D'autre part, la structure thermique de la stratosphère, et donc sa circulation, dépendent également de la présence d'ondes atmosphériques, en particulier les ondes de Rossby, dont nous décrivons le rôle. Enfin, nous décrivons la nature des échanges entre la stratosphère et la troposphère. Ils sont importants dans notre étude car ils permettent le transport des espèces à longue durée de vie tels que les CFC qui, émis à la surface terrestre, vont pouvoir atteindre le vortex polaire.

2.1 La circulation stratosphérique générale

2.1.1 Structure thermique

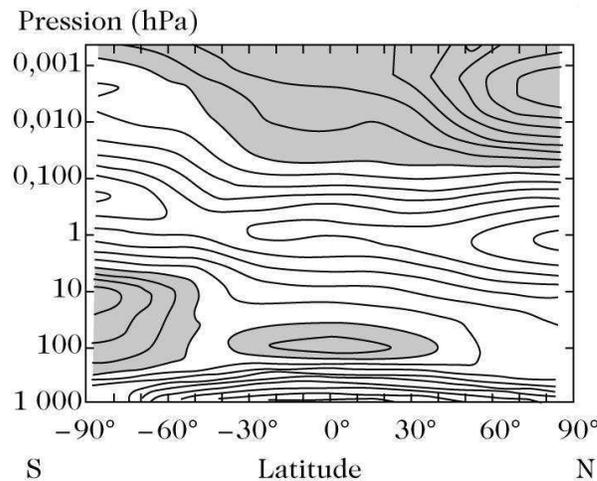


Fig. I.2.1 : Coupe verticale de la température en moyenne mensuelle (juillet) et zonale. Température observée d'après FLEMMING et al. [32]. Intervalle des contours : 10°C. Les zones grisées indiquent les températures inférieures à -60°C . Extrait de JAMES [47].

La FIG. I.2.1 fournit un exemple de la répartition zonale des températures moyennées pour le mois de juillet. De 10 à 1 hPa, la température croît avec l'altitude, ce qui donne une structure stratifiée aux masses d'air et inhibe les mouvements verticaux qui sont de faible amplitude. Cette augmentation de température est due au chauffage de l'intérieur par l'ozone stratosphérique qui absorbe une partie du rayonnement UV solaire. Cependant, le rayonnement solaire n'est pas le seul responsable du profil thermique stratosphérique qui est aussi déterminé par le pilotage d'ondes atmosphériques (décrites dans la suite à la section 2.2.2).

La stratosphère est quasiment isotherme dans les basses couches sauf dans l'hémisphère d'hiver où un important gradient de température existe à la limite entre les latitudes éclairées et celles plongées dans la nuit polaire (vers 66° de latitude). La structure méridienne du champ de températures dans la stratosphère est très différente de celle observée dans la troposphère. Ainsi, dans la basse stratosphère, la température est minimale à l'équateur et maximale au pôle d'été ainsi qu'aux moyennes latitudes de l'hémisphère d'hiver. Au-dessus de 10 hPa, la température

décroît régulièrement du pôle d'été au pôle d'hiver.

2.1.2 Circulation zonale et méridienne

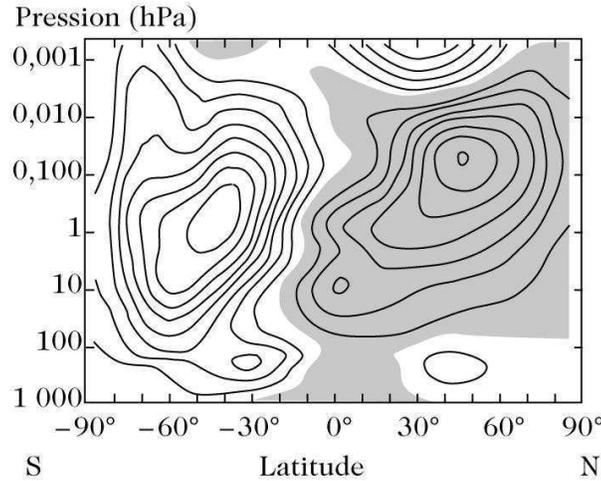


Fig. I.2.2 : Coupe latitude-pression du vent zonal ($m.s^{-1}$) en moyenne mensuelle (juillet) et zonale, d'après la climatologie de FLEMMING et al. [32]. Intervalle des contours : $10 m.s^{-1}$; les vents d'est sont indiqués par des zones grisées. Extrait de JAMES [47].

Dans la stratosphère, la circulation zonale varie avec la latitude et la FIG. I.2.2 fournit une climatologie de la moyenne zonale sur le mois de juillet du vent zonal. Dans la basse stratosphère, cette circulation zonale est induite par les deux jets troposphériques centrés vers les bandes de latitude $[30^{\circ} : 40^{\circ}]$, avec des vents pratiquement deux fois plus forts en hiver qu'en été. Dans la plus grande partie de la stratosphère, au-dessus de 50 hPa, et dans la mésosphère, les vents zonaux moyens dominants sont d'ouest en hiver et d'est en été, avec un maximum d'environ $70 m.s^{-1}$ dans la haute stratosphère (vers 1 hPa). Le noyau de vent d'ouest situé dans l'hémisphère d'hiver entre 0.1 et 10 hPa correspond au vortex polaire qui isole les régions polaires de l'influence des latitudes plus basses. Ce vortex polaire est engendré par l'important gradient de température présent dans l'hémisphère d'hiver, comme nous le décrivons dans la suite à la section 2.2.1.

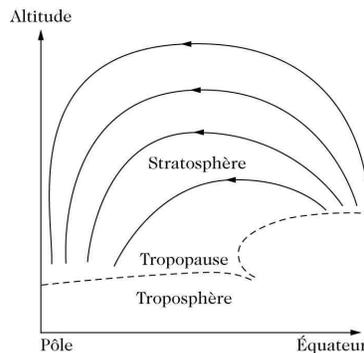


Fig. I.2.3 : Circulation de Brewer-Dobson. Extrait de JAMES [47].

La circulation méridienne est dominée par une grande cellule appelée circulation de Brewer-Dobson, proposée en 1940 pour expliquer la différence de localisation entre les régions où l'ozone

stratosphérique est produit et les régions où l'on observe les maxima de concentration d'ozone. Cette cellule, présente de part et d'autre de l'équateur, est représentée pour un hémisphère sur la FIG. I.2.3. Elle est caractérisée par des ascendances équatoriales qui sont le prolongement de mouvements troposphériques (cellules de Hadley avec un transport ascendant dans les tropiques et subsident aux moyennes latitudes) et par des subsidences aux moyennes et hautes latitudes. Il faut approximativement une saison à une masse d'air empruntant ce trajet pour passer de l'équateur au pôle d'hiver. Notons que dans la haute stratosphère et au-dessus, la circulation méridienne comporte une cellule unique initiée dans les régions tropicales et orientée vers le pôle d'hiver. D'après HOLTON *et al.*, la circulation de Brewer-Dobson apparaît essentiellement comme le résultat du déferlement dans la stratosphère hivernale d'ondes d'origine troposphériques : les ondes de Rossby.

2.2 Événements dynamiques particuliers

2.2.1 Le vortex polaire

La distribution verticale moyenne de la température (*c.f.* FIG. I.1.3, page 13) montre que la stratosphère est caractérisée par une augmentation de la température d'environ 60°C entre la tropopause et la stratopause, cet échauffement résultant de l'absorption des rayons UV par l'ozone stratosphérique. L'équilibre radiatif (équilibre entre l'énergie absorbée par la matière et l'énergie radiative émise) est alors assuré par un refroidissement lié aux processus d'émission dans l'IR, principalement par le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau. Après les équinoxes d'automne (en septembre dans l'hémisphère nord et en juin dans l'hémisphère sud), les régions polaires privées de rayonnement solaire ne bénéficient plus de l'échauffement dû à l'ozone. Le refroidissement par IR expose alors très rapidement la stratosphère polaire à des températures très basses, inférieures à celles des moyennes latitudes, ce qui produit un fort gradient horizontal de températures. Les vents zonaux d'ouest sont très intenses autour du 65° parallèle (supérieurs à $100\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$) et ils entraînent la formation d'un gigantesque tourbillon de circulation que l'on appelle le **vortex polaire**.

La formation du vortex polaire est donc conditionnée par l'existence de l'ozone dans la stratosphère. Paradoxalement, cette isolation des régions polaires engendre des processus physico-chimiques qui se conjuguent pour conduire à la perte de l'ozone observée au début du printemps. Nous décrivons ce phénomène dans la section 3.3 de cette partie.

2.2.2 Les ondes de Rossby

Pour étudier la dynamique de l'atmosphère, il convient de distinguer les valeurs moyennes des différentes variables de leurs fluctuations. Le mouvement ondulatoire de ces fluctuations constitue les ondes atmosphériques. Ces ondes intéressent des échelles spatiales s'étendant du mètre au millier de kilomètre. Mais dans la stratosphère, l'étude de la structure des ondes observées montre que la majorité d'entre elles sont des ondes de grande échelle appelées ondes planétaires.

Les **ondes de Rossby** sont des ondes planétaires dont l'initiation est due à l'orographie et à la variation de la force de Coriolis (rotation de la Terre) selon la latitude. Ces ondes se propagent avec un déplacement rétrograde (elles se dirigent vers l'ouest dans le sens opposé de la circulation générale) jusqu'aux moyennes latitudes de la stratosphère. Sous certaines conditions, elles peuvent déferler et communiquent ainsi leur énergie au milieu environnant. Il en résulte un déplacement méridien des particules qui va entraîner, par conservation de la masse, un

mouvement ascendant d'air dans les régions tropicales et un mouvement descendant à haute et moyenne latitude entretenant ainsi la circulation de Brewer-Dobson. Le mouvement descendant est contrebalancé par un refroidissement radiatif conduisant à des températures polaires plus élevées que celles de l'équilibre radiatif.

La zone de déferlement est appelée *surf zone* (zone de mélange) dans l'hémisphère d'hiver comme illustré sur la FIG. I.2.4. En effet, dans l'hémisphère d'hiver, le zone de déferlement est bornée par de véritables barrières dynamiques que sont le vortex polaire et la barrière subtropicale (à la frontière des courants ascendants tropicaux). La *surf zone* est caractérisée par un fort mélange horizontal des espèces chimiques à longue durée de vie. En déferlant, les ondes de Rossby perturbent le vortex polaire qui n'est donc pas nécessairement symétrique ni centré au-dessus du pôle. Des structures filamenteuses de constituants chimiques "s'échappent" du vortex polaire et se mélangent dans la *surf zone*. Le vortex arctique est moins stable que son homologue existant en Antarctique car il est perturbé par les ondes de Rossby qui sont plus intenses dans l'hémisphère nord que dans l'hémisphère sud.

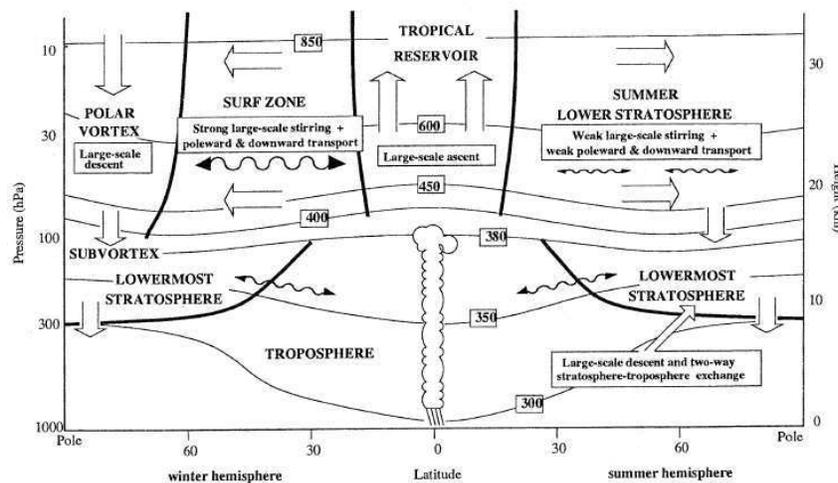


Fig. I.2.4 : Illustration schématique des processus dynamiques de l'UTLS. Les lignes fines représentent les isentropes (surfaces de même température potentielle) et les lignes épaisses représentent les barrières dynamiques. En-dessous de la surface isentrope 380°K (middle world) dans les régions extratropicales, la ligne épaisse représente la tropopause. La Lowermost Stratosphere est la région où les surfaces isentropes rencontrent la tropopause : les échanges entre la stratosphère et la troposphère se produisent le long des isentropes. Au-dessus de la surface isentrope 380°K (overworld), les surfaces isentropes sont entièrement situées dans la stratosphère. La Surf Zone, zone de mélange, est la région du déferlement des ondes planétaires dans les régions extratropicales de l'hémisphère d'hiver. Cette zone est située entre deux barrières : barrière subtropicale (bordure du réservoir tropical) et bordure du vortex polaire. Extrait de BRASSEUR ET SOLOMON [7].

Notons qu'il existe d'autres ondes influençant la dynamique atmosphériques. Par exemple, les ondes équatoriales (telles que les ondes de Kelvin et les ondes mixtes de Rossby-gravité) propagent l'énergie de la troposphère vers la stratosphère au niveau des tropiques.

2.2.3 Les échanges stratosphère-troposphère

Les valeurs des rapports de mélange des constituants chimiques de l'atmosphère, notamment l'ozone et la vapeur d'eau, changent brutalement de part et d'autre de la tropopause car cette couche de transition entre **la partie haute de la troposphère et la partie basse de la**

stratosphère (UTLS) se comporte comme une entité quasi-matérielle. Les échanges de la troposphère vers la stratosphère se produisent surtout aux tropiques. L'air troposphérique pénètre de manière adiabatique dans la stratosphère (en grande partie par le phénomène d'*overshoot* convectif). Ce transfert de matière est associé à la branche ascendante de la circulation de Brewer-Dobson. Des constituants mineurs de la troposphère à longue durée de vie (comme les CFC) pénètrent donc ainsi dans la stratosphère. Le transport d'une particule d'air de la tropopause équatoriale aux moyennes et hautes latitudes de la stratosphère dure typiquement de 3 à 7 ans. Par contre, les échanges de la stratosphère vers la troposphère se produisent en une à deux années, surtout aux moyennes latitudes.

Suite à une descente adiabatique pilotée par l'activité ondulatoire, l'air stratosphérique atteint la région nommée *Lowermost Stratosphere* sur la FIG. I.2.4 où l'air peut franchir la tropopause par certains transports adiabatiques (BRASSEUR ET SOLOMON [7], HOLTON [42]). Les échanges dans la *Lowermost Stratosphere* peuvent aussi se produire par d'autres phénomènes (tel que la perturbation du vortex polaire par les ondes de Rossby) qui peuvent notamment se manifester sous forme de longs filaments qui se mélangent ensuite de manière irréversible avec de l'air des plus basses latitudes.

3

Chimie de l'ozone

L'ozone est un des constituants les plus importants de la stratosphère car il est la seule espèce capable d'absorber efficacement le rayonnement solaire UV (de longueurs d'onde comprises entre 220 et 300 nm). Bien qu'en faible concentration dans l'atmosphère, l'ozone assure ainsi un filtrage du rayonnement nocif pour les organismes vivants et reste indispensable à la conservation de la biosphère.

Plus de 90% des molécules d'ozone se situent dans la stratosphère, d'où l'appellation de *réservoir stratosphérique*. Une des particularités de l'ozone réside donc dans sa distribution verticale très différente de celle des autres composés chimiques (*c.f.* FIG. I.1.4 page 14) : le profil de concentration d'ozone présente en effet des valeurs faibles en surface et dans la troposphère et ces valeurs augmentent avec l'altitude dans la basse et moyenne stratosphère. L'altitude de la concentration maximale d'ozone varie en fonction de la latitude (plus basse aux pôles, vers 15-20 km, qu'à l'équateur, vers 25-30 km) et de la saison (plus basse en hiver qu'en été).

Dans la haute stratosphère, l'ozone atteint rapidement son équilibre photochimique et les mouvements de l'air n'ont ainsi quasiment aucun impact sur sa distribution. Par contre dans la basse stratosphère, le temps caractéristique de la production photochimique devient grand par rapport à l'échelle de temps des processus dynamiques et la distribution de l'ozone dépend fortement des phénomènes de transport dans cette région. L'équilibre naturel de l'ozone est bien décrit par les processus chimiques mis à jour par CRUTZEN [19].

La diminution de l'ozone stratosphérique retient l'attention de la communauté scientifique depuis les années 1970. Celle-ci s'est alors mobilisée pour comprendre un des problèmes environnementaux les plus importants du siècle passé. En raison des rejets de CFC dus aux activités anthropiques, l'équilibre naturel de l'ozone a été totalement modifié, conduisant à une forte diminution de l'ozone stratosphérique au-dessus de l'Antarctique que l'on nomme **trou de la couche d'ozone**. D'après les simulations numériques effectuées pour tenter de prévoir l'évolution de la couche d'ozone selon divers scénarios d'émission plausibles, il ressort que le temps de réponse de l'atmosphère moyenne aux perturbations anthropiques est de plusieurs décennies. Ainsi, même si les émissions de CFC sont fortement réduites, voire stoppées, le trou de la couche d'ozone persistera chaque printemps austral jusqu'en 2060 environ.

3.1 Description du champ d'ozone

Pour une description globale (*sur l'ensemble du globe*) du champ d'ozone, on s'intéresse à sa colonne totale. La colonne totale d'ozone représente la quantité d'ozone contenue dans une colonne d'air s'étendant de la surface jusqu'au sommet de l'atmosphère. Ce paramètre

conditionne l'efficacité de l'absorption d'une partie du rayonnement solaire UV au cours de sa traversée de l'atmosphère. L'unité couramment utilisée est l'unité Dobson (DU). Une unité Dobson correspond à une épaisseur théorique d'ozone d'un centième de millimètre à température et pression standards (273 K et 1013.25 hPa). Avec une telle épaisseur, on trouve 2.69×10^{16} molécules d'ozone par cm^2 . La valeur moyenne annuelle et globale de la colonne totale d'ozone est de l'ordre de 300 DU, soit 3 mm d'épaisseur théorique.

Alors que la principale source d'ozone se situe dans la zone équatoriale où le rayonnement solaire intense photodissocie le dioxygène, la colonne totale d'ozone est maximale dans les régions polaires, comme le montre la FIG. I.3.1. En conséquence, on peut d'ores et déjà présager du rôle important des phénomènes de transport, et en particulier du transport méridien (circulation de Brewer-Dobson). D'autre part, les valeurs maximales aux moyennes et hautes latitudes ne sont pas en phase avec le maximum d'insolation. Les valeurs maximales de colonnes totales sont relevées à la fin de l'hiver et au printemps et les minimales en automne. Notons qu'au pôle sud, le trou de la couche d'ozone apparaît aux mois de septembre et d'octobre.

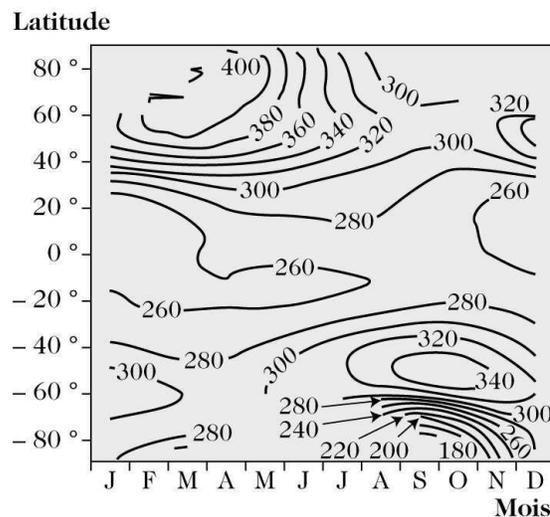


Fig. I.3.1 : Colonne totale d'ozone (en DU) en fonction de la latitude et du mois. Ces valeurs sont issues des mesures de l'instrument TOMS (Total Ozone Mapping Spectrometer), moyennées sur les années 1997 à 2001. La technique de mesure utilisant le rayonnement UV rétrodiffusé, les données sont absentes dans les régions de nuit polaire. Extrait de DELMAS et al. [22].

Les maxima observés aux moyennes et hautes latitudes sont principalement dus à la circulation de Brewer-Dobson décrite précédemment dans la section 2.1.2. Cette circulation est caractérisée par un mouvement ascendant aux tropiques et par une subsidence aux moyennes et hautes latitudes qui correspond aux maxima de la FIG. I.3.1. Comme nous l'avons décrit précédemment (section 2.2.2), les ondes de Rossby sont plus actives dans l'hémisphère nord et le vortex polaire arctique est moins stable que le vortex polaire antarctique. Cette différence se retrouve dans les colonnes totales d'ozone qui sont maximales à proximité du pôle dans l'hémisphère nord alors qu'elles le sont dans la bande $[60^\circ \text{S} : 40^\circ \text{S}]$ dans l'hémisphère sud. En effet, le vortex polaire antarctique joue le rôle d'une barrière dynamique qui va couper la circulation de Brewer-Dobson.

Des variations à des échelles de temps plus courtes, mais pouvant tout de même atteindre 50 % du contenu global en quelques jours, sont observées aux moyennes et hautes latitudes.

Elles sont dues au déferlement des ondes de Rossby, surtout en hiver, qui génèrent sur la surface des barrières dynamiques (vortex polaire et barrière subtropicale) des structures filamenteuses au moyen desquelles s'opère un mélange d'ozone entre les hautes et moyennes latitudes ainsi qu'entre les tropiques et les moyennes latitudes. Notons que des déformations de la tropopause, provoquées par des perturbations dans la moyenne et la haute troposphère, peuvent modifier les valeurs de la colonne totale d'ozone.

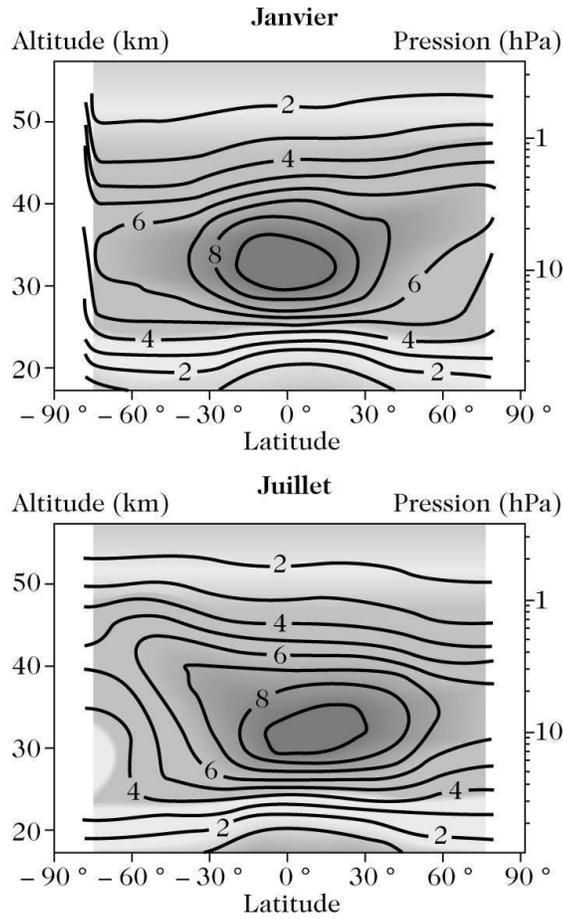


Fig. I.3.2 : Moyennes zonales du rapport de mélange d'ozone (en ppmv) en janvier (haut) et en juillet (bas), mesurées par les instruments HALOE et MLS à bord du satellite UARS. Extrait de DELMAS et al. [22].

On pourrait penser que l'ozone est produit là où son rapport de mélange est maximal, dans la tranche verticale 30-40 km (haute stratosphère) sur la FIG. I.3.2, puis transporté vers les plus hautes latitudes aux altitudes plus basses. Cependant une étude plus fine montre qu'il n'en est rien. Le maximum de rapport de mélange d'ozone coïncide avec une région de courte durée de vie photochimique dans laquelle l'ozone est en équilibre photochimique (*c.f.* FIG. I.1.6 à la page 17). Le transport méridien, dont le temps caractéristique dans la stratosphère est de l'ordre de quelques années, ne peut donc pas intervenir sur l'ozone produit dans cette région. Par conséquent, les tropiques ne peuvent pas être la source des fortes colonnes totales observées aux hautes latitudes. En fait, la source de l'ozone extratropical est une étroite région de transition (*c.f.* FIG. I.1.6) où la distribution de l'ozone est contrôlée autant par la photochimie que par le

transport. Le flux méridien, dirigé vers le pôle et vers les basses altitudes, traverse cette zone dans l'hémisphère d'hiver de manière assez rapide pour transporter des valeurs de rapport de mélange plus élevées que celles trouvées à des niveaux inférieurs (BRASSEUR *et al.* [6]).

3.2 Équilibre naturel de l'ozone stratosphérique

Dès 1930, CHAPMAN [13] a proposé un cycle de trois réactions pour justifier les hauts niveaux de concentration d'ozone dans la stratosphère. En présence d'un tiers corps M (en général une molécule de O₂ ou de N₂), un atome d'oxygène O réagit avec une molécule de O₂ pour former l'ozone :



M est un stabilisant des produits de la réaction (I.3.1). Cette réaction se produit essentiellement dans la haute stratosphère équatoriale à des altitudes supérieures à 30 km où l'ensoleillement est maximum (produisant les maxima de rapport de mélange visibles sur la FIG. I.3.2). L'oxygène atomique O peut provenir de la photolyse de l'oxygène moléculaire O₂ provoquée par le rayonnement UV de courte longueur d'onde (inférieure à 242 nm) en haute atmosphère :



Par recombinaison avec l'oxygène atomique, l'ozone participe à la reformation de l'oxygène moléculaire :



Le bilan global de ce cycle de trois réactions est nul.

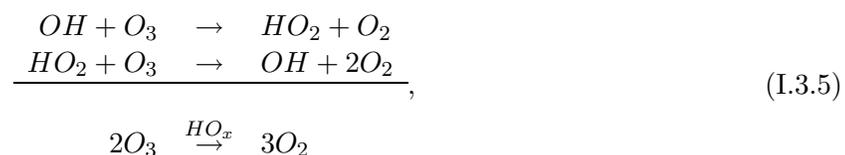
En réalité, l'oxygène atomique O provient majoritairement de la photodissociation de l'ozone, ou ozonolyse, nécessitant un rayonnement UV de longueur d'onde inférieure à 320 nm :



Cette réaction photolytique est équilibrée par la réaction de recombinaison I.3.1. Elle participe au rôle de bouclier de la stratosphère contre les rayonnements UV.

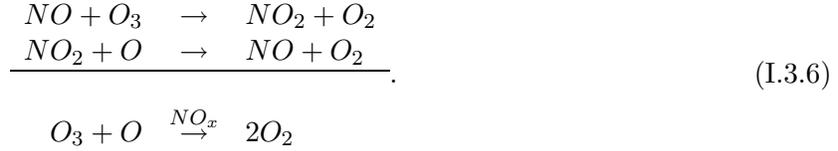
Mais ce mécanisme ne permet pas de rendre compte de la composition de la stratosphère "naturelle" et conduit à une surestimation par rapport aux observations. La réaction I.3.3 de destruction de l'ozone ne constitue qu'environ 20 % de la destruction naturelle de l'ozone. Des réactions catalytiques susceptibles de détruire l'ozone ont alors été identifiées. Les catalyseurs de ces réactions sont des constituants minoritaires présents à des teneurs bien inférieures à celle de l'ozone. En revanche, ils ne sont pas consommés par les réactions et peuvent ainsi jouer un rôle quantitatif dans la destruction de l'ozone (CRUTZEN [19]). Les catalyseurs peuvent en effet participer à un grand nombre de cycles, souvent entre 100 et 1000. Cela explique comment des espèces chimiques aux concentrations très inférieures peuvent avoir un impact important sur l'ozone.

Dans les années 50, un premier cycle de catalyse par les radicaux hydrogénés HO_x est proposé. Il participe pour 10 % à la destruction de l'ozone stratosphérique. Son initiation est effectuée par la génération de OH et HO₂. Les réactions chimiques sont :



les radicaux étant régénérés lors des réactions.

Dans les années 60, la montée en puissance du trafic aérien a conduit à proposer un cycle de catalyse de destruction comparable impliquant les NO_x . Ce cycle participe pour 70 % à la destruction de l'ozone stratosphérique. Nous n'introduisons ici que les deux réactions chimiques suivantes :

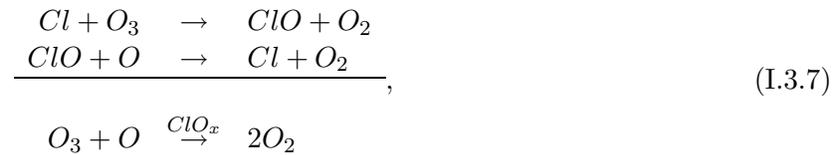


Les autres réactions chimiques impliquées alternent le jour et la nuit. Les NO_x stratosphériques proviennent d'une source naturelle : l'oxydation par l'oxygène atomique de l'oxyde nitreux N_2O (qui peut par exemple être généré par le travail des bactéries dans les sols), et d'une source anthropique constituée par les avions.

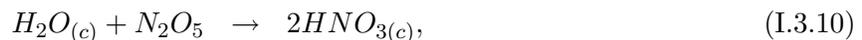
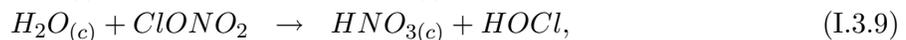
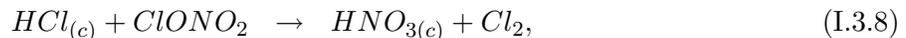
3.3 Le trou de la couche d'ozone

Dans les années 70, d'autres cycles de catalyse de destruction de l'ozone impliquant les CFC sont découverts. Caractérisés par leur grande stabilité chimique et leurs pouvoirs solvant et calorifique, les CFC ont été massivement utilisés par l'industrie à partir des années 1950. À la différence des composés chlorés naturels de courte durée de vie atmosphérique (1 an ou moins) et dont seule une faible fraction parvient dans la stratosphère, les CFC ont une longue durée de vie (par exemple, 60 ans pour les CFCl_3 et 120 ans pour les CF_2Cl_2). Ils sont transportés jusque dans la stratosphère où ils sont photodissociés, libérant ainsi le radical Cl. Les produits de la photodissociation des CFC sont très instables et à leur tour, ils sont rapidement photodissociés et augmentent ainsi la teneur globale en chlore atomique Cl (MOLINA ET ROWLAND [75]).

Le chlore participe à la destruction de l'ozone stratosphérique par le cycle de catalyse en chimie homogène suivant :



Le chlore se recombine également sous forme d'espèces réservoirs plus stables telles que le ClONO_2 et le HCl. Ces derniers composés sont ensuite transformés par chimie hétérogène¹ durant la nuit polaire en espèces réservoirs chlorées Cl_2 et HOCl. Les nuages stratosphériques polaires (PSC), composés d'aérosols, d'eau, d'acide sulfurique H_2SO_4 et d'acide nitrique HNO_3 sous forme solide, offrent des surfaces disponibles pour des réactions de chimie hétérogène :

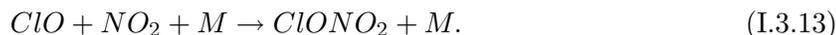


¹Cela signifie que les réactifs sont dans des phases différentes (solide, liquide ou gazeuse).

où (c) indique que le réactif est sous forme condensée (liquide ou solide).

Ces réactions permettent d'accumuler les espèces réservoirs Cl_2 et HOCl tout au long de l'hiver polaire (pendant la nuit polaire donc) aux altitudes des PSC. À la fin de l'hiver, dès le retour des rayons du soleil, ces composés sont photodissociés et libèrent de grandes quantités de chlore atomique Cl . Ainsi, les atomes de chlore détruisent massivement et rapidement l'ozone stratosphérique via la réaction $\text{Cl} + \text{O}_3 \rightarrow \text{ClO} + \text{O}_2$ du cycle catalytique (I.3.7).

Normalement, le monoxyde de chlore ClO pourrait se recombinaison sous la forme réservoir ClONO_2 par la réaction :



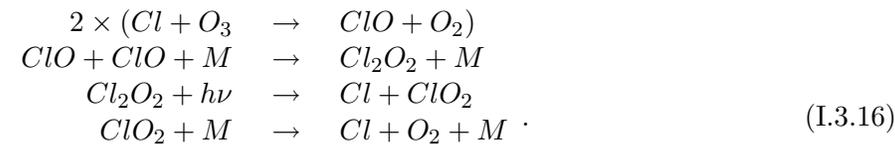
Mais à cause de la dénitrification de la stratosphère (HNO_3 est progressivement fixé sur les PSC lors des réactions (I.3.8) à (I.3.11)), le dioxyde d'azote NO_2 a perdu une de ses sources dans la réaction :



Ceci a pour conséquence une accumulation de ClO qui peut alors se recombinaison avec une autre molécule de ClO si la température de la stratosphère est suffisamment basse et ainsi passer sous la forme de dimère Cl_2O_2 :



Le dimère Cl_2O_2 est alors photodissocié en libérant les atomes de chlore, prêts à recommencer le cycle catalytique de destruction de l'ozone par l'action isolée des composés chlorés (MOLINA ET MOLINA [74]) :



D'autres cycles de catalyse impliquant l'action isolée des composés bromés ainsi que l'action couplée des composés chlorés et bromés existent.

Ces processus sont à l'origine de l'existence du trou d'ozone antarctique au printemps austral, découvert par FARMAN [29]. Au cours des mois de septembre et d'octobre, l'épaisseur de la couche d'ozone au-dessus du continent antarctique peut afficher des valeurs 50 % plus faibles que dans les conditions pré-industrielles. La perte chimique d'ozone est cantonnée à l'intérieur du vortex polaire. Les conditions de basse température qui y règnent sont propices à la formation des PSC. Une diminution des concentrations d'ozone est également observée en Arctique, mais elle est moins prononcée que celle de l'hémisphère sud du fait d'une différence importante de la dynamique. Comme nous l'avons exposé dans la section 2.2.2, le vortex arctique n'est pas aussi stable que celui de l'Antarctique, et l'hiver polaire arctique est généralement plus chaud de 5 à 15° K au niveau de la stratosphère, ce que montre la FIG. I.3.3. Pourtant, cela n'empêche pas la formation de PSC et la quantité d'ozone détruit peut y être non négligeable (MANNEY *et al.* [66]). REX *et al.* [80] ont montré que 50 % de la variabilité inter-annuelle de l'ozone stratosphérique arctique peut être expliquée par la destruction chimique. Les phénomènes de destruction chimique de l'ozone liés aux PSC sont importants à considérer dans ce travail de thèse, car nous nous intéressons à l'étude globale de l'ozone à la fin de l'hiver austral.

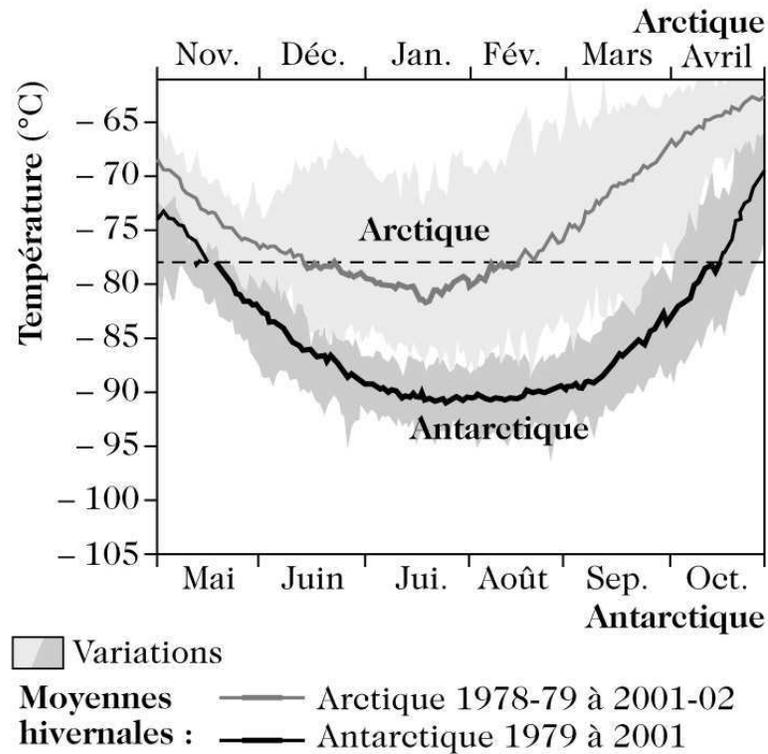


Fig. I.3.3 : Températures minimales à 50 hPa observées en Arctique et en Antarctique sur la période 1978-2001. Le trait horizontal à $\approx -78^\circ\text{C}$ indique le seuil de formation des nuages stratosphériques polaires à 195°K . Extrait de WMO [104].

Les mesures réglementaires prises dans le cadre du Protocole de Montréal signé en 1987 et dans ses amendements ultérieurs ont abouti à une décroissance notable des composés CFC dans la troposphère. Toutefois, le contenu en chlore effectif de la stratosphère continue à être dominé par les émissions de CFC des années 1950-1990. D'après les estimations issues des modèles de chimie stratosphérique, le rétablissement de la couche d'ozone est prévu pour 2060-2075 (WMO [105]). Néanmoins, l'évolution de la couche d'ozone ne dépend pas uniquement des concentrations en constituants chlorés. Elle est également soumise aux variations météorologiques de l'UTLS. Ainsi, dans le contexte du changement climatique, l'augmentation des concentrations des gaz à effet de serre dans l'atmosphère entraîne une hausse des températures dans la troposphère et à la surface du globe. En même temps, il se produit un effet de refroidissement dans la stratosphère. Une stratosphère plus froide favorise une formation plus fréquente de PSC et accentue ainsi la destruction d'ozone dans les régions polaires, et plus particulièrement en Arctique. Cet effet du changement climatique pourrait retarder le rétablissement de la couche d'ozone. Dans ce contexte, la surveillance des teneurs en ozone de l'atmosphère est de mise. Elle est réalisée par des systèmes d'observation opérationnels et continus dans le temps basés sur des instruments embarqués à bord de satellites tels que l'instrument IASI.

4

La chimie atmosphérique vue depuis l'espace

Comme nous l'avons vu jusqu'à présent, l'atmosphère contient un grand nombre de composés qui proviennent de sources nombreuses et variées et dont les concentrations sont très variables dans l'espace et dans le temps. L'étude de ces composés nécessite de disposer de mesures précises, spécifiques, de haute résolution spatiale, et ce dans une gamme étendue de concentrations. Les mesures des composés atmosphériques peuvent être réalisées *in-situ* depuis le sol ou depuis l'espace par télédétection.

Dans l'atmosphère terrestre, les processus chimique, dynamique et radiatif s'étendent de l'échelle locale à l'échelle globale. La couverture sporadique et localisée des mesures à partir du sol ou provenant de campagnes ballons et aéroportées ne permet pas d'appréhender de manière globale les processus mis en jeu (ces mesures sont cependant utiles à une validation crédible d'un système de modélisation complexe). Le domaine spatial, avec sa couverture planétaire, s'est donc tout naturellement inséré dans les thématiques de chimie atmosphérique. Les mesures effectuées à partir de l'espace permettent en effet d'accéder à une cartographie détaillée de notre planète en termes de constituants chimiques et de paramètres atmosphériques. Nous détaillons dans la première section de ce chapitre les spécificités des observations satellites utilisées en chimie atmosphérique.

La problématique environnementale concernant le trou de la couche d'ozone stratosphérique a fait de ce constituant chimique l'un des plus mesurés. Dans cette thèse, nous avons assimilé des observations satellites des concentrations d'ozone afin d'obtenir une description complète du champ d'ozone de "bonne qualité". De la qualité des mesures et de l'exploitation de leurs caractéristiques dépend la qualité du résultat de l'assimilation de données que nous réalisons. Nous avons travaillé en particulier à la meilleure prise en compte de la répartition spatiale des observations réalisées par des instruments embarqués à bord des satellites de dernière génération. Cette exploitation de la répartition spatiale des observations est étudiée via l'assimilation des données provenant des instruments **MLS** et **IASI** embarqués respectivement sur les satellites **Aura** et **Metop-A**. Dans la seconde section de ce chapitre, nous détaillons de manière précise les caractéristiques de ces deux instruments et de leurs satellites.

4.1 Caractéristiques des mesures chimiques satellitaires

Les mesures spatiales sont fortement dépendantes des caractéristiques des instruments qui les produisent, mais aussi des paramètres orbitaux du satellite sur lequel ces instruments sont

embarqués. Les satellites en orbite autour de la Terre peuvent être rangés en deux catégories selon leur orbite : les satellites géostationnaires, statiques (en orbite à 36 000 km d'altitude environ), et les **satellites défilants**, en mouvement autour de la Terre (en orbite entre 600 et 800 km d'altitude). Les satellites géostationnaires sont principalement utilisés en météorologie, permettant de se concentrer sur une région de la Terre en particulier, alors que les satellites défilants sont bien adaptés à l'étude globale des champs de constituants atmosphériques. Leur trace au sol peut être concentrée sur les latitudes tropicales ou remonter vers les hautes latitudes jusqu'à proximité d'un pôle : on parle alors de satellite en **orbite polaire**. Enfin, si leur trajectoire est en phase avec le soleil, ils sont dits **héliosynchrones**.

Les mesures spatiales sont réalisées par télédétection. Celle-ci peut être active ou passive, selon que l'observateur modifie, ou non, le système qu'il entend mesurer au moyen d'un rayonnement. La télédétection active, regroupée en deux familles (radar et lidar), est assez peu utilisée dans le domaine spatial lié à la chimie atmosphérique, alors que les techniques de télédétection passive le sont depuis plus de 30 ans.

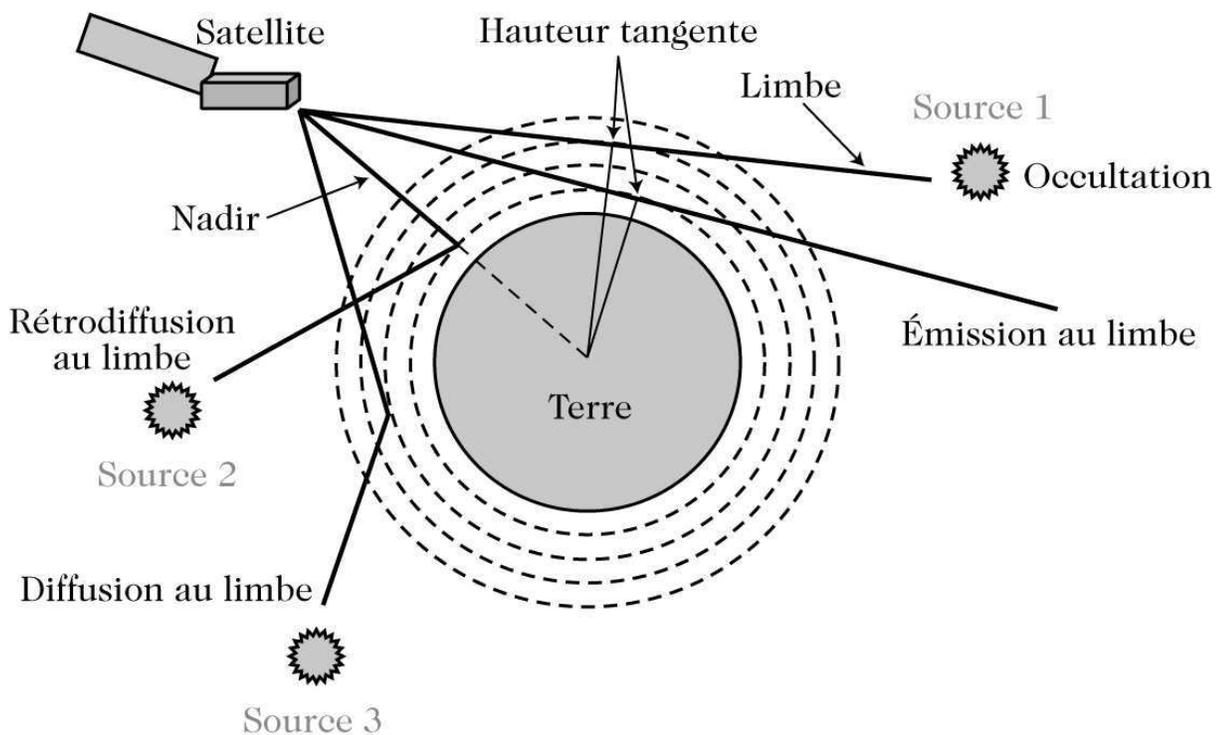


Fig. I.4.1 : Visées au nadir et au limbe associées à diverses méthodes de mesures : occultation, émission au limbe, rétrodiffusion et diffusion au limbe. Extrait de DELMAS et al. [22].

Comme l'illustre la FIG. I.4.1, il existe deux principales familles de visée : les **visées au nadir**, qui concernent toute visée d'instrument atteignant la surface de la Terre comme celle de l'instrument IASI, et les **visées au limbe**, pour lesquelles le cheminement du rayonnement ne heurte pas la surface terrestre comme celle de l'instrument MLS qui mesure par émission au limbe. Ainsi, les visées au nadir fournissent des renseignements sur la colonne atmosphérique, sur les couches troposphériques pour de nombreux domaines de télédétection car cette couche contient 90 % de la matière, et les visées au limbe sur les couches plus élevées, de la troposphère à la mésosphère. Certaines procédures de balayage permettent d'élargir le domaine détecté par l'instrument.

Les mesures spatiales s'effectuent sur une gamme de longueurs d'ondes étendue, du domaine UV jusqu'au micro-ondes, en passant par le visible et l'IR. Malgré cela, tout le domaine spectral n'est pas accessible du fait de la présence de fortes raies d'absorption de certains composés. Selon le domaine spectral, on utilise en général deux types de mesure du rayonnement : par absorption (avec une source ponctuelle extérieure à l'atmosphère terrestre) ou par émission (avec une source généralement étendue).

Nous venons d'évoquer les principales caractéristiques des instruments. Une fois les mesures réalisées, il faut traiter le signal reçu sous forme de radiances (passage des données de niveau 1 à des données de niveau 2), ce qui est réalisé par des méthodes dites d'inversion. Plusieurs méthodes d'inversion existent pour estimer la valeur des paramètres géophysiques compris dans les radiances : estimation optimale, réseau de neurones, etc...

La sensibilité verticale de l'instrument est généralement traduite à l'aide de fonctions de balayage, aussi appelées fonctions de lissage ou encore **Averaging Kernels**, que l'on notera AK dans la suite de cette thèse. Deux AK théoriques sont représentés sur la FIG. I.4.2. Celui de gauche est un exemple d'AK parfait : chaque pic de l'AK donne l'altitude du maximum de sensibilité et cet hypothétique AK fournit une information précise à sept niveaux verticaux distincts. Celui de droite est un exemple typique d'AK mesurant dans l'IR avec peu de sensibilité dans la couche limite atmosphérique. Les AK fournissent donc une information importante sur la verticale mais leur utilisation peut être coûteuse (*c.f.* section 1 de la partie V à la page 145).

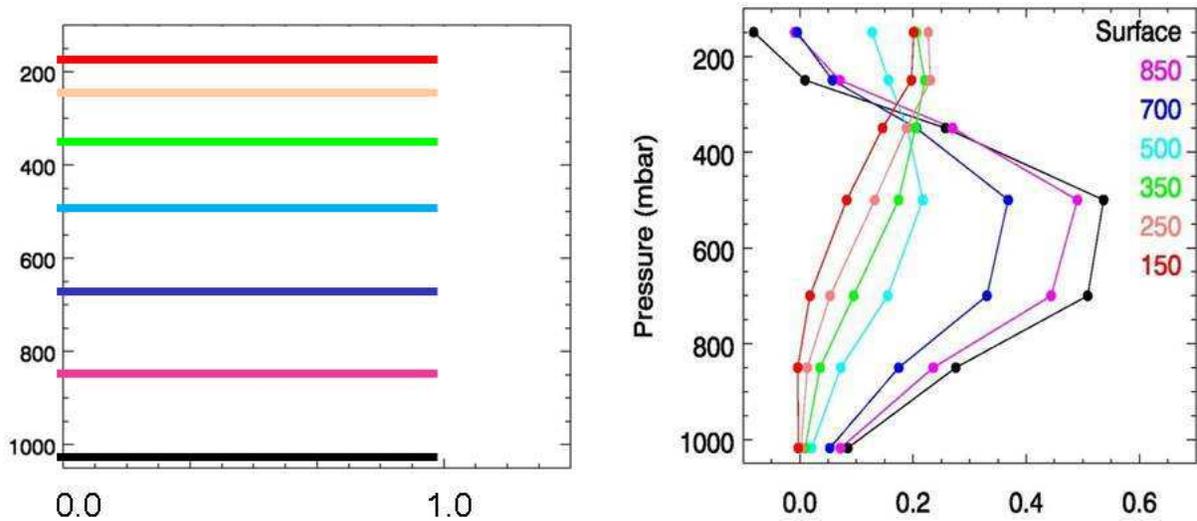


Fig. I.4.2 : *Averaging Kernels théoriques : parfait à gauche et typique à droite. Sensibilité (Full Width at Half Maximum (FWHM), inférieure à 1) en abscisse et pression en ordonnée (mbar).*

Les dernières caractéristiques associées aux mesures, importantes à considérer de notre point de vue, concernent certains paramètres associés. Citons notamment l'erreur de mesure qui est un indicateur important de la qualité des observations. Les résolutions horizontales, verticales et temporelles sont également des variables clés des mesures issues de satellites. Le nombre très élevé d'observations réalisées par les instruments de dernière génération et la finesse des pixels de ces instruments dotent ces observations d'une information très riche, que, précisément, nous cherchons à exploiter dans cette thèse. Notons que l'augmentation du nombre de données d'un instrument est répercuté sur le temps du traitement de ces données et donc sur le délai d'attente avant de pouvoir accéder ces données.

4.2 Caractéristiques des instruments MLS et IASI et de leurs satellites

Nous détaillons dans cette section les caractéristiques des instruments MLS et IASI car nous assimilons des mesures d'ozone qui en sont issues (*c.f.* parties III et IV). Cependant, de nombreux instruments réalisent des mesures d'ozone, notamment parmi les autres instruments embarqués sur les satellites *Aura* et *Metop-A*.

4.2.1 L'instrument MLS embarqué à bord du satellite *Aura*

Troisième satellite de la Nasa du système d'observation de la Terre après *Aqua* et *Terra*, *Aura* a pour mission d'étudier la qualité de l'air, l'ozone stratosphérique et l'évolution du climat. En orbite polaire et héliosynchrone à 705 km d'altitude depuis le 15 juillet 2004, quatre instruments sont embarqués à bord de ce satellite. Le High Resolution Dynamic Limb Sounder (HIRDLS) étudie la distribution globale des températures et des espèces chimiques dans la stratosphère et la haute troposphère. Le Tropospheric Emission Spectrometer (TES) mesure dans l'IR les différents types de pollution dans la troposphère jusqu'à une altitude d'environ 10 km. L'Ozone Monitoring Instrument (OMI) vise la surveillance de la couche d'ozone dans la stratosphère. Et enfin, le radiomètre au limbe en hyperfréquence **Microwave Limb Sounder** (MLS), utilisé dans ce travail de thèse, mesure les radiances émises dans le domaine micro-ondes et fournit des profils verticaux des constituants chimiques depuis la haute troposphère jusqu'à la mésosphère.

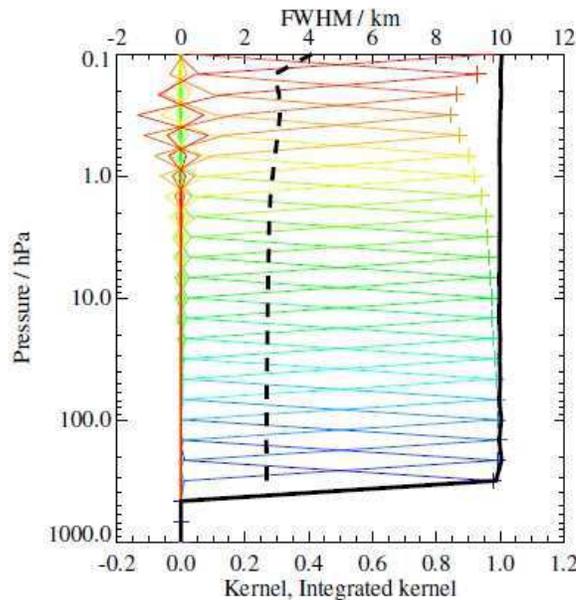


Fig. I.4.3 : Exemple d'Averaging Kernels pour la mesure de l'ozone obtenus des radiances de MLS à l'équateur. Extrait de LIVESEY *et al.* [62].

L'heure d'acquisition des données provenant d'*Aura*/MLS est 13H30 LST². MLS restitue l'ozone entre 13 et 70 km. Dans cette thèse, nous utilisons la version v2.2 de ses produits d'ozone car une validation détaillée de ce produit et des comparaisons avec d'autres jeux de donnée existent dans FROIDEVAUX *et al.* [35] et LIVESEY *et al.* [61]. Ils trouvent que, dans le milieu de

²Local Solar Time

la stratosphère, les données d’ozone MLS possèdent de faibles biais, avec une erreur aléatoire de l’ordre de 5 %. L’erreur est similaire dans la haute troposphère et dans la basse stratosphère. MLS mesure également les constituants dans l’UTLS où les inversions sont faites à 4 niveaux, à savoir 215 hPa, 147 hPa, 100 hPa et 68 hPa. Néanmoins, l’erreur est plus grande dans cette région avec des valeurs allant de 5 % à 100 % en-dessous de 100 hPa et de 2 % à 30 % à 100 hPa. Un exemple d’AK de MLS est fourni par la FIG. I.4.3. On peut constater que ses pics sont régulièrement espacés entre 0.1 hPa et 200 hPa.

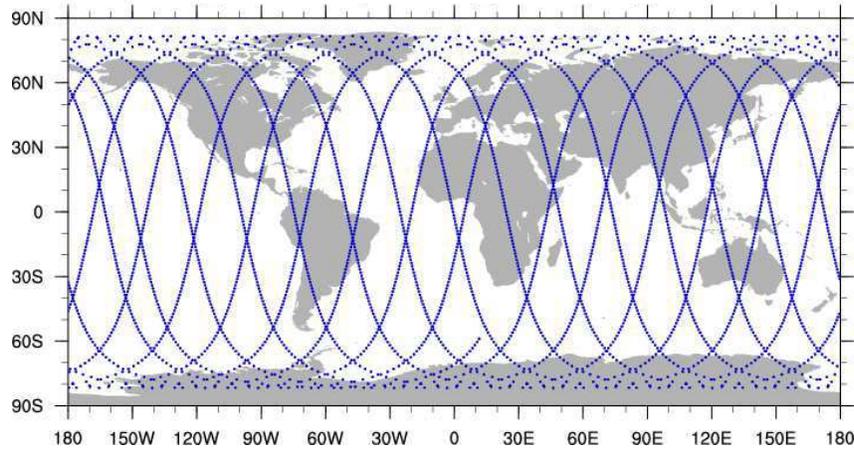


Fig. I.4.4 : Exemple de couverture spatiale des profils MLS réalisés sur une journée (18 mai 2006).

Concernant la répartition horizontale des observations MLS, notons que deux observations successives de MLS sont séparées par une distance de 1.5° . Un exemple de couverture spatiale des profils MLS réalisés sur une journée est représenté sur la FIG. I.4.4. En règle générale, MLS fournit plus de 2 500 profils verticaux par jour et réalise plus d’observations aux latitudes supérieures à 60° qu’aux autres latitudes (*c.f.* Table I.4.1).

Tab. I.4.1 : Nombre moyen de colonnes totales IASI et de profils MLS produits par jour et par bande de latitude. Exemple pour le mois de septembre 2008. Il s’agit du nombre après traitement des données de niveau 1 et certaines observations ont été rejetées, ce qui explique la dissymétrie du nombre des observations par rapport à la latitude.

Bandes de lat.	IASI	MLS
90° S : 60° S	40 000	530
60° S : 30° S	37 000	370
30° S : 30° N	91 000	660
30° N : 60° N	41 000	400
60° N : 90° N	36 000	560
global	245 000	2 530

4.2.2 L’instrument IASI embarqué à bord du satellite *Metop-A*

Lancé le 19 octobre 2006, le satellite Meteorological Operational A (*Metop-A*) est le premier d’une série de 3 satellites météorologiques défilants. Le projet MetOp, associant l’Agence Spatiale Européenne (ESA) et l’organisation EUMETSAT, a pour objectifs de fournir des données

permettant d'effectuer des prévisions météorologiques à moyen terme et d'aider à la réalisation d'études climatiques et environnementales à moyen terme. En orbite polaire et héliosynchrone à 800 km d'altitude, douze instruments de mesures météorologiques sont embarqués à bord de ce satellite : le sondeur hyperfréquences pour la détermination de l'humidité (MHS), l'instrument pour la surveillance de l'ozone à l'échelle du globe (GOME-2), le diffusionmètre de pointe (ASCAT), le récepteur GNSS de sondage atmosphérique (GRAS), le radiomètre de pointe à très haute résolution (AVHRR 3), le sondeur hyperfréquence de technologie avancée (AMSU/A), le sondeur haute résolution du rayonnement IR (HIRS), le spectromètre pour la mesure des flux de particules ionisés dans l'espace (SEM 2), le système Argos, deux charges utiles de recherche et de sauvetage pour le réseau international Cospas-Sarsat et l'**Interféromètre Atmosphérique de Sondage dans l'Infrarouge (IASI)**.

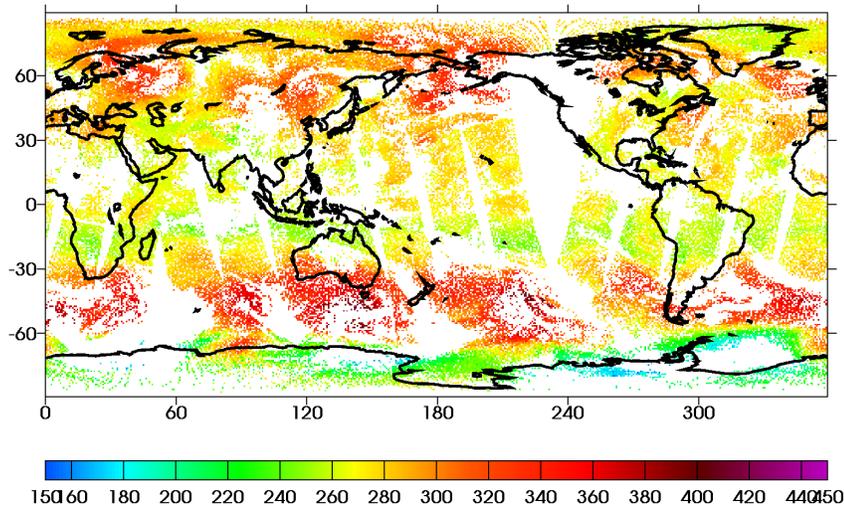


Fig. I.4.5 : Exemple de colonnes totales d'ozone (DU) mesurées par l'instrument IASI sur une durée de 12H (1^{er} septembre 2008).

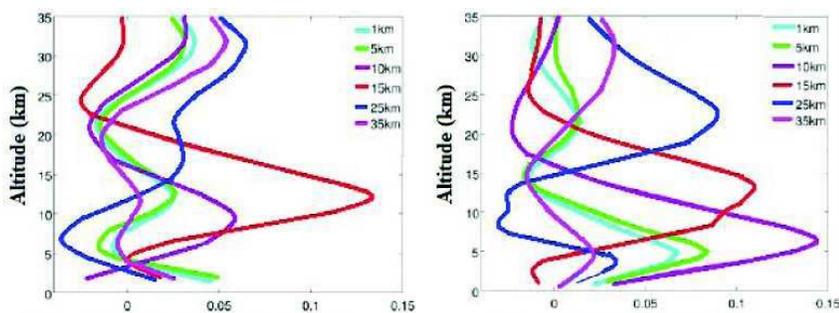


Fig. I.4.6 : Exemple d'Averaging Kernels pour la mesure de l'ozone obtenus des radiances de IASI : au-dessus des surfaces continentales à gauche et au-dessus des océans à droite, sensibilité (FWHM) versus altitude (km). Extrait de SCANNEL et al. [85].

IASI mesure le spectre des radiations IR émises par le système Terre-atmosphère sur une largeur de bande d'environ 2200 nm, tous les 50 km au nadir (avec 4 empreintes de 12 km de diamètre). L'heure d'acquisition des données provenant de *Metop-A*/IASI est 9H30 LST. Le satellite *Metop-A* réalise une orbite terrestre complète en environ 100 min et fournit ainsi une cartographie complète de la Terre toutes les 12 h. Il en résulte un grand nombre d'observations

et par exemple, durant le mois de septembre 2008, environ 245 000 colonnes totales d'ozone IASI sont disponibles chaque jour. Un exemple de colonnes totales d'ozone mesurées par IASI sur une journée est représenté sur la FIG. I.4.5. On peut constater sur cet exemple que la répartition horizontale des observations IASI est bien plus dense que celle de MLS.

Dans cette thèse, nous n'utilisons pas les AK de IASI pour des raisons que nous exposerons dans la suite. Après traitement des données, nous assimilons des colonnes totales dont les écarts-types d'erreur sont majoritairement inférieurs à 10 %. Nous fournissons tout de même un exemple d'AK à six niveaux sur la FIG. I.4.6. On peut constater d'une part que la répartition verticale de l'information varie énormément en fonction de la surface terrestre, qui constitue la source de l'émission IR mesurée par IASI, et d'autre part que les pics des AK ne sont pas régulièrement répartis et que leur sensibilité est inférieure par rapport à l'exemple de la FIG. I.4.3 d'AK obtenus des mesures de MLS.

Deuxième partie

Les outils numériques

Imite, assimile, et ensuite innove...
Phrase-vocation du trompettiste de jazz Clark Terry.

Sans l'apparition d'outils suffisamment solides, avec la maîtrise de métaux tels que le bronze, la sculpture ne s'exercerait encore que sur le bois ou des matériaux malléables. Ses formes ne seraient pas aussi diverses qu'aujourd'hui et bien des œuvres n'existeraient pas. Avec le perfectionnement des outils s'affinent et se multiplient les possibilités. Il en va de même pour la compréhension des phénomènes chimiques de l'atmosphère.

Notre compréhension de la chimie atmosphérique s'appuie maintenant largement sur les outils numériques à disposition, notamment les modèles numériques ou les systèmes d'assimilation de données. Ceux-ci sont en constant développement, comme par exemple les modèles **Mocage** du CNRM/Météo-France, Chimere de l'IPSL-INERIS, Polair3D du CEREA et TM5 du KNMI, ou les systèmes d'assimilation de données tels que **Valentina** du CERFACS, Bascoe du BIRA et Polyphemus du CEREA.

Cette seconde partie du manuscrit est majoritairement théorique. Elle décrit l'ensemble des outils numériques qui seront nécessaires à la compréhension des études menées dans mon travail de thèse. Une littérature foisonnante, sous forme de livres, d'articles et de cours, présente ces outils numériques. Nous essayons d'être suffisamment exhaustifs pour donner les pistes utiles au lecteur qui souhaite approfondir certains aspects particuliers abordés, sans toutefois les développer trop dans le détail. Cette partie s'ouvre par la description des méthodes d'assimilation de données. Nous y introduisons le formalisme mathématique et les concepts nécessaires à l'élaboration de ces méthodes, la façon dont les erreurs sont prises en compte ainsi que les principales caractéristiques des méthodes variationnelles. Puis nous explicitons la modélisation de la chimie atmosphérique au sein du modèle de chimie-transport Mocage utilisé dans cette thèse. Enfin, les bases du système d'assimilation de données Valentina, sur lequel s'appuie mon travail, sont décrites. Nous approfondirons certains des aspects clés de ce système dans les parties suivantes.

1

L'assimilation de données

L'assimilation de données est un outil d'analyse mathématique dont le but est de décrire l'état d'un système (physique ou chimique par exemple) en utilisant l'ensemble des informations disponibles de façon la plus adéquate possible. L'état réel du système est bien évidemment inconnu. Il est impossible de le décrire avec justesse et dans sa globalité pour la plupart des systèmes, et ce d'autant plus si ils sont complexes. Pour estimer au mieux cet état réel, l'assimilation de données combine les diverses sources d'informations sur ce système. Cette information peut par exemple provenir d'un modèle numérique, qui traduit les équations de la physique sous forme discrète, mais aussi d'observations du système distribuées en temps et en espace.

Historiquement, la paternité des premières techniques d'assimilation de données est controversée (voir par exemple MASSART [67] pour plus de détails). Néanmoins, elles peuvent être datées de la fin du XVIII^e siècle, début XIX^e siècle avec Mayer, Legendre, Laplace et Gauss. Des géosciences, la météorologie s'empara la première de l'assimilation de données (GANDIN [36]). Son développement moderne voit le jour pour répondre à des besoins opérationnels, notamment la nécessité de définir des conditions initiales précises pour obtenir une prévision météorologique de qualité (TALAGRAND [88]).

L'assimilation de données est utilisée entre autres afin de :

1. définir aussi précisément que possible un état (atmosphérique ou autre) comme condition initiale en vue d'une prévision ;
2. estimer de manière optimale l'état d'un système sur toute une période de temps pour des études de variabilité par exemple ;
3. optimiser les paramétrisations et identifier les erreurs systématiques d'un modèle numérique ;
4. extrapoler l'estimation aux variables non observées ;
5. optimiser la conception de réseaux d'observation.

L'assimilation de données constitue ainsi un outil fondamental pour (i) analyser les tendances à plus long terme des processus physiques et chimiques de l'atmosphère et (ii) les comprendre et les surveiller.

Le système atmosphérique terrestre est d'une telle complexité que sa traduction par des équations mathématiques ne peut se faire qu'à l'aide de plusieurs hypothèses simplificatrices. Les équations mathématiques servent de base aux modèles numériques. De plus, les estimations des modèles numériques sont déduites à partir d'une condition initiale. En général, cette condition initiale provient d'une précédente prévision. Elle constitue une connaissance *a priori*, ou ébauche, emprunte d'une erreur que l'on nomme l'erreur d'ébauche. Par ailleurs, on dispose

aussi d'informations sur le système atmosphérique terrestre provenant d'observations *in-situ* et satellitaires. Ces observations ne sont que des approximations de la réalité, approximations qui sont prises en compte par la notion d'erreur de mesure. Les observations sont généralement hétérogènes en nature et en répartition et ne sont pas forcément liées directement aux variables du modèle. La comparaison du modèle aux observations est réalisée par le biais de l'opérateur d'observation. Lors de cette comparaison, on commet une erreur que l'on appelle l'erreur de représentativité qui traduit par exemple l'impossibilité de représenter des structures plus petites que les mailles du modèle numérique. Tout l'art de l'assimilateur réside dans la combinaison optimale - en considérant les incertitudes - des diverses sources d'information. Ce fonctionnement est illustré par la FIG. II.1.1 pour l'optimisation de la condition initiale.

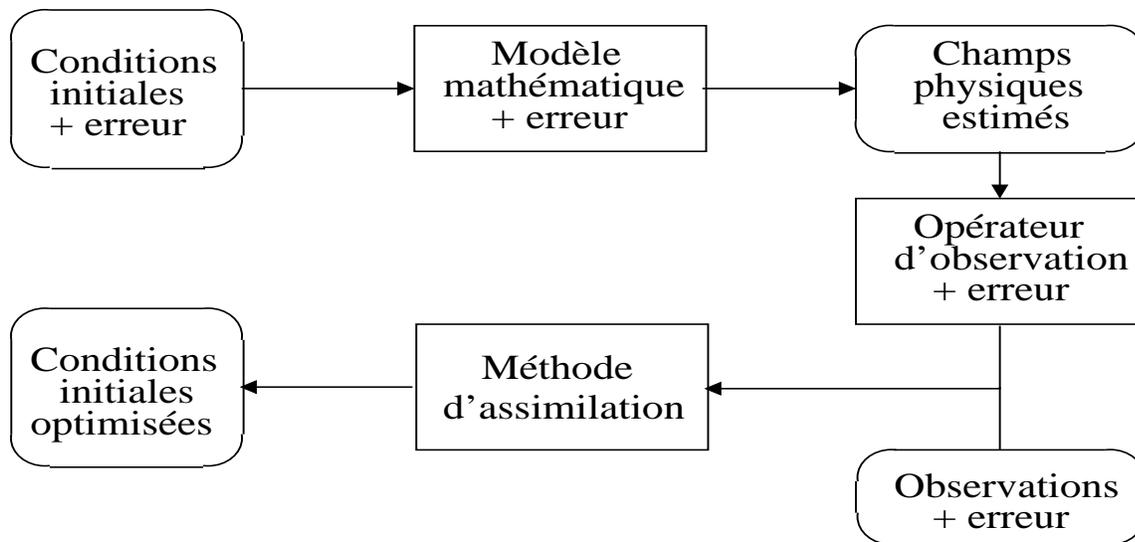


Fig. II.1.1 : Principe de l'optimisation de la condition initiale d'un modèle mathématique par l'assimilation de données.

L'assimilation de données a été introduite relativement récemment en chimie atmosphérique : en 1995 par FISHER ET LARY [30] pour la stratosphère et en 1997 par ELBERN *et al.* [25] pour la troposphère. En combinant les champs physiques estimés par un modèle de chimie-transport (MCT) avec les observations, elle permet d'obtenir une image plus réaliste de l'évolution de la composition de l'atmosphère (LAHOZ *et al.* [54]). Les méthodes d'assimilation sont habituellement séparées en deux familles : l'une stochastique avec les **filtres de Kalman** (KALMAN [50]) ; et l'autre déterministe avec les **méthodes variationnelles**. Le travail réalisé dans cette thèse n'étant pas basé sur les méthodes stochastiques, nous nous contentons de les introduire dans l'annexe A. Avant de décrire les méthodes variationnelles qui sont utiles à la compréhension de ce travail de thèse, les deux sections suivantes introduisent le formalisme mathématique ainsi que certains concepts contenus dans ces méthodes.

1.1 Formalisme mathématique et concepts

Dans cette section, nous précisons certaines des notions que nous venons d'introduire brièvement. Puis nous décrivons l'assimilation de données comme un problème inverse que nous résolvons dans la suite. La présentation ci-dessous de l'assimilation de données s'inspire de celle faite par BOUTTIER [5], mais aussi de celle de RICCI [81].

1.1.1 Définitions

Le vecteur d'état

Dans notre cas, l'état du modèle est défini par une série de nombres ordonnés en **vecteur d'état** noté \mathbf{x} . Le choix de la discrétisation détermine comment les composantes vectorielles sont liées à l'état vrai du système. Ce choix est équivalent au choix d'une base en mathématique. Plusieurs vecteurs d'état peuvent donc être définis. Il n'est pas possible de décrire la réalité parfaitement car elle ne peut pas être représentée dans un vecteur. Classiquement, le vecteur \mathbf{x}^t sera la meilleure représentation possible de la réalité que l'on nomme l'**état vrai**. Généralement, le choix initial du vecteur d'état est \mathbf{x}^b , l'estimation *a priori*, ou **ébauche**, de l'état vrai avant que le processus d'assimilation de données ne soit réalisé. Ce processus, ainsi que son résultat noté \mathbf{x}^a , sont appelés **analyse**.

La variable de contrôle

L'analyse n'est pas toujours effectuée sur le vecteur d'état. En effet, il est souvent intéressant de ne pas résoudre le problème en prenant en compte toutes les variables du vecteur d'état. Ceci pour plusieurs raisons. Tout d'abord, les variables peuvent être de nature différente. Le problème est alors dit **multivarié**. Et pour des raisons de simplicité, on peut le découpler en plusieurs problèmes **univariés**. Ensuite, certaines variables sont difficiles à prendre en compte. On dispose généralement de peu d'informations sur chacune d'entre elles, sur leurs erreurs en particulier. Enfin, il est parfois nécessaire de réduire la taille du problème pour des questions de coût numérique.

En effet, les besoins des modèles de prévision changent avec l'évolution des capacités informatiques. Il est souvent souhaitable d'augmenter la résolution des modèles ou d'en améliorer la sophistication. D'autre part, le nombre d'observations disponibles est toujours croissant, notamment depuis l'arrivée des satellites, et la prise en compte d'un grand nombre d'observations alourdit le processus d'assimilation de données. Il peut alors être primordial de réduire le coût des méthodes d'assimilation de données.

La **variable de contrôle** est la variable sur laquelle on choisit de travailler afin d'améliorer la représentation du vecteur d'état. Avec certaines méthodes (voir section 1.3.3), le problème de l'assimilation peut par exemple être de trouver l'**incrément** $\delta\mathbf{x}$ vers l'état analysé tel que

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \delta\mathbf{x} \quad (\text{II.1.1})$$

soit le plus proche possible de \mathbf{x}^t . Une simple translation permet alors de transformer le problème : au lieu de s'intéresser à \mathbf{x}^a , on peut donc choisir $(\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b)$ comme variable de contrôle dans le sous-espace adéquat.

Les observations

Chaque analyse utilise des observations qui sont rassemblées dans un **vecteur d'observation** \mathbf{y}^o . Leur utilisation dans la méthode d'analyse dépend de la possibilité de les comparer avec le vecteur d'état. Idéalement, il y aurait une observation pour chaque variable du vecteur d'état en chaque point et en chaque instant du modèle. En pratique, le nombre d'observations est généralement inférieur à celui des variables du vecteur d'état. De plus, les observations peuvent être disposées irrégulièrement en espace et en temps et être d'une nature différente à celle des variables du modèle.

Ainsi il peut être nécessaire de transformer les variables du vecteur d'état pour les comparer aux observations. On définit donc une fonction permettant de passer de l'espace du modèle à celui des observations. Cette fonction, nommée **opérateur d'observation** \mathcal{H} , permet d'obtenir un équivalent du modèle $\mathcal{H}[\mathbf{x}]$ dans l'espace des observations. Cet équivalent modèle est la valeur que devrait avoir l'observation si la mesure de l'observation, l'état du modèle et l'opérateur d'observation étaient parfaits. Tous trois contiennent une part d'erreur et on écrit l'approximation :

$$\mathbf{y}^o \approx \mathcal{H}[\mathbf{x}]. \quad (\text{II.1.2})$$

En pratique, l'opérateur d'observation \mathcal{H} est construit sur la base d'opérateurs d'interpolation en temps et en espace et d'opérateurs transformant les variables du modèle en paramètres observés. Par exemple, en chimie atmosphérique, il peut transformer les concentrations d'une espèce chimique sur différents niveaux de pression en une radiance mesurée par les satellites.

L'innovation et le résidu d'analyse

L'élément essentiel de l'assimilation de données est la comparaison entre les observations et le vecteur d'état. En utilisant les éléments introduits dans le paragraphe précédent, il est possible de définir un vecteur d'écart $\mathbf{d} = \mathbf{y}^o - \mathcal{H}[\mathbf{x}]$ entre les observations et leurs équivalents. Ce vecteur est appelé **vecteur d'innovation** quand le vecteur d'état est l'ébauche et s'écrit :

$$\mathbf{d} = \mathbf{y}^o - \mathcal{H}[\mathbf{x}^b]. \quad (\text{II.1.3})$$

Il s'appelle **vecteur du résidu d'analyse** quand le vecteur d'état est l'analyse et s'écrit alors :

$$\mathbf{d} = \mathbf{y}^o - \mathcal{H}[\mathbf{x}^a]. \quad (\text{II.1.4})$$

Ces deux vecteurs sont particulièrement importants puisqu'ils permettent de mesurer l'écart aux observations et l'impact de l'assimilation de données sur cet écart. Leur étude est donc très instructive (TALAGRAN [89]).

Le modèle de propagation

À l'instant t_i , on note $\mathbf{x}(t_i)$ le vecteur d'état du modèle et \mathbf{y}_i^o le vecteur des observations. L'évolution temporelle de \mathbf{x} est régie par un **modèle de propagation** \mathcal{M} . Ce modèle de propagation est une représentation mathématique des lois de la physique discrétisées en espace et en temps. Il permet d'intégrer \mathbf{x} de l'instant t_{i-1} à l'instant t_i :

$$\mathbf{x}(t_i) = \mathcal{M}(t_{i-1}, t_i)[\mathbf{x}(t_{i-1})]. \quad (\text{II.1.5})$$

La fonctionnelle \mathcal{M} , *a priori* non-linéaire, dépend généralement de l'état du modèle à l'instant t_i ainsi que des forçages et des conditions aux limites.

Par récurrence sur l'EQ. II.1.5, on peut écrire le vecteur d'état à l'instant t_i en fonction de la condition initiale :

$$\mathbf{x}(t_i) = \mathcal{M}(t_0, t_i)[\mathbf{x}(t_0)]. \quad (\text{II.1.6})$$

En conséquence, nous pouvons définir $\mathbf{x}(t_0)$ comme variable de contrôle. Dans la suite de ce travail de thèse, nous chercherons la meilleure estimation de la condition initiale.

Nous pouvons réécrire l'EQ. II.1.2 pour le vecteur d'observation \mathbf{y}_i^o au temps t_i en y intégrant l'EQ. II.1.6 :

$$\mathbf{y}_i^o \approx \mathcal{H}_i[\mathcal{M}(t_0, t_i)[\mathbf{x}(t_0)]], \quad (\text{II.1.7})$$

où \mathcal{H}_i est l'opérateur d'observation au temps t_i .

1.1.2 L'assimilation de données comme un problème inverse

Mathématiquement, l'assimilation de données peut être appréhendée comme un problème inverse, dont la formulation s'explique ainsi :

$$\mathcal{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{Y}, \quad (\text{II.1.8})$$

où le vecteur des inconnues \mathbf{X} est estimé en inversant la fonctionnelle \mathcal{F} par rapport à un vecteur connu \mathbf{Y} . Dans notre cas, les variables d'entrée (contenues dans \mathbf{X}) représentent schématiquement la composition chimique atmosphérique dont on souhaite améliorer l'estimation. Le vecteur \mathbf{Y} inclut les observations. La fonctionnelle \mathcal{F} , *a priori* non-linéaire, décrit les relations entre les éléments inconnus et connus. Elle peut par exemple représenter les équations du modèle numérique qui dictent l'évolution temporelle de notre composition atmosphérique ou encore les relations entre les variables du modèle et les variables observées.

Sous la forme d'un problème inverse, toute la complexité de l'assimilation de données réside dans la formulation de \mathcal{F} et la recherche de \mathbf{X} . Cependant, de nombreuses hypothèses et approximations, faites plus ou moins implicitement, sont nécessaires afin de contourner les difficultés théoriques et pratiques.

L'EQ. II.1.7 considérée pour l'ensemble des instants t_i peut être vue comme un système qui s'exprime sous la forme de l'EQ. II.1.8 comme suit :

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}(t_0)) \approx \mathbf{Y}, \quad (\text{II.1.9})$$

où \mathbf{Y} contient le vecteur des observations $\mathbf{y}^o = (\dots, \mathbf{y}_i^o, \dots)$. En ce sens, le problème d'assimilation de données est mathématiquement équivalent à un problème inverse classique (WUNSCH [106]).

L'EQ. II.1.9 liée aux observations constitue en général un système sous-déterminé. Pour l'unicité de la solution, il est recommandé de résoudre un problème **surdéterminé**, ce qui est obtenu par la prise en compte de l'état de l'ébauche et de son erreur sur la variable de contrôle :

$$\mathbf{x}^b \approx \mathbf{x}(t_0). \quad (\text{II.1.10})$$

En combinant les EQS. II.1.7 et II.1.10, le problème d'assimilation peut être formulé comme le système :

$$\left\{ \begin{array}{c} \vdots \\ \mathcal{H}_i[\mathcal{M}(t_0, t_i)[\mathbf{x}(t_0)]] \\ \vdots \\ \mathbf{x}(t_0) \end{array} \right\} \approx \left\{ \begin{array}{c} \vdots \\ \mathbf{y}_i^o \\ \vdots \\ \mathbf{x}^b \end{array} \right\}. \quad (\text{II.1.11})$$

Le vecteur \mathbf{Y} de l'EQ. II.1.9 contient dorénavant le vecteur des observations \mathbf{y}^o ainsi que l'ébauche de la condition initiale \mathbf{x}^b . En résolvant simultanément les équations provenant des observations et celles provenant du modèle, l'algorithme d'assimilation cherche une solution \mathbf{x} cohérente avec les observations et les équations du modèle.

D'un point de vue pratique, le dimensionnement du problème d'assimilation est l'une de ses principales caractéristiques. Les modèles de chimie atmosphérique contiennent généralement plusieurs millions de variables indépendantes à un instant donné. Il faut y ajouter le nombre d'informations provenant des observations qui, dans le cas de satellites de dernière génération, s'élève à plusieurs centaines de milliers sur une journée (voir beaucoup plus en considérant la

répartition verticale de l'information associée à ces données). La dimension du problème est déjà conséquente mais tout à fait accessible aux capacités de calcul informatique actuelles.

Les difficultés liées au dimensionnement du système résident dans un aspect pas encore explicité jusqu'à présent : l'incertitude des informations. Rappelons que l'ébauche et les observations sont entachées d'erreurs comme le traduit l'approximation dans le système d'Eqs. II.1.11. Or, si n représente la dimension de notre système initial, la prise en compte de ces erreurs revient à considérer un nouveau système de dimension n^2 . Nous expliquons à présent comment ces erreurs sont exprimées.

1.2 La prise en compte des erreurs

1.2.1 De l'importance des erreurs

Nous nous plaçons dans un cas où les observations appartiennent au même espace que le modèle (elles sont donc comparables sans transformation). Il est alors possible de définir une méthode d'analyse telle que l'état analysé soit égal aux observations dans leur voisinage et égal à un état arbitraire partout ailleurs, par exemple une climatologie ou une précédente prévision. Cette méthode s'apparente au schéma d'analyse dit de Cressman, qui est souvent utilisé pour des systèmes d'assimilation simples.

Supposons que l'on ait un modèle mono-dimensionnel. La variable observée est une variable du vecteur d'état \mathbf{x} , supposée univariée et représentée par les valeurs aux points de grille. L'indice k désigne un des N points d'observation et l'indice j un point de grille. On note \mathbf{y}_k^o l'observation au point k et \mathbf{x}_j^b l'ébauche au point j . L'analyse de Cressman permet d'obtenir un état analysé du modèle \mathbf{x}^a défini en pondérant l'innovation en chaque point de grille j telle que

$$\mathbf{x}_j^a = \mathbf{x}_j^b + \frac{\sum_{i=1}^N w_{j,k}(\mathbf{y}_i^o - \mathbf{x}_j^b)}{\sum_{i=1}^N w_{j,k}}, \quad (\text{II.1.12})$$

$$w_{j,k} = \max\left(0, \frac{R^2 - d_{j,k}^2}{R^2 + d_{j,k}^2}\right), \quad (\text{II.1.13})$$

où $d_{j,k}$ est la distance entre les points j et k et $w_{j,k}$ est une fonction de poids dont le maximum est égal à l'unité quand le point de grille j est situé sur l'observation k et qui décroît en fonction de la distance entre j et k pour devenir nulle quand $d_{j,k} > R$. Le paramètre R est donc défini comme un rayon d'influence au-delà duquel les observations n'ont plus d'influence. Un exemple d'une telle analyse de Cressman est représenté par la FIG. II.1.2.

D'autres variantes de la méthode de Cressman existent. La fonction de poids peut être, par exemple, redéfinie telle que $w_{j,k} = \exp\left(\frac{-d_{j,k}^2}{2R^2}\right)$. Malgré tout l'intérêt que la méthode de Cressman et ses dérivées peuvent avoir, elles restent limitées. En effet, la forme de la fonction w impose la structure spatiale de la relaxe lors du passage d'une observation à une autre. Il est nécessaire que ces observations appartiennent au même espace que le modèle. Il n'est aucunement garanti que l'analyse respectera les propriétés physiques du système telles que les relations entre les variables du modèle. D'autre part, toutes les données sont de précieuses sources d'information, sans être complètement justes. Nous devons donc faire un compromis entre le modèle et les observations en considérant leurs erreurs respectives.

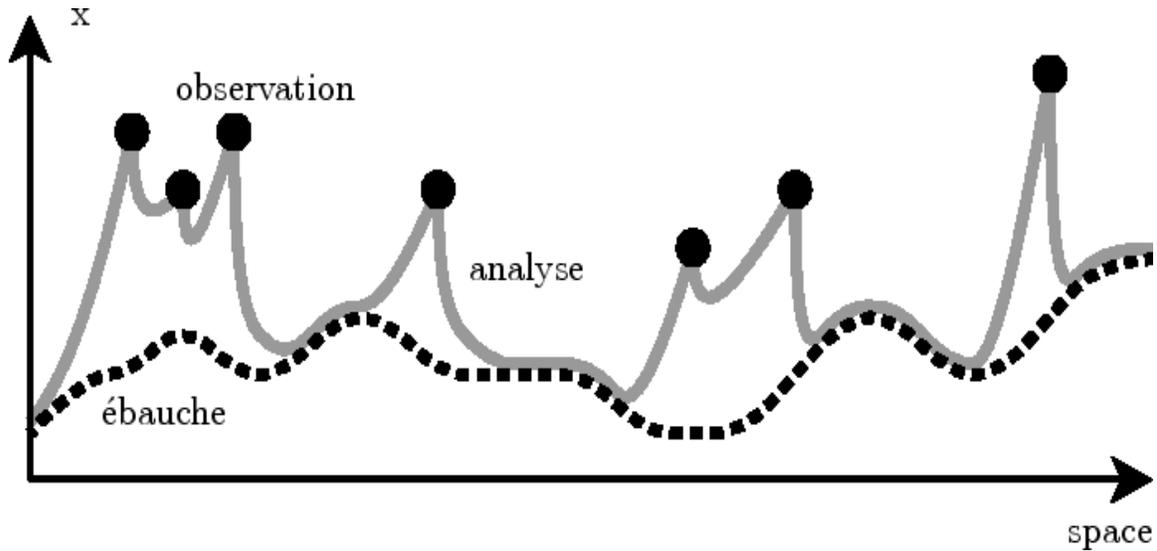


Fig. II.1.2 : Exemple d'une analyse de Cressman mono-dimensionnelle. L'état de l'ébauche est représenté par la courbe noire pointillée, les observations par les points noirs et l'état analysé par la courbe grise. Extrait de DAGET [20].

1.2.2 Une approche statistique

Du fait de sa simplicité, l'analyse de Cressman reste très utile comme point de départ. Cependant son illustration sur un exemple simple nous a permis de mettre en évidence l'importance de la confiance accordée à chaque information relative au système observé. Il est difficile de savoir en quelles sources d'information avoir confiance. L'idée de l'assimilation de données est donc de construire un système qui tente de minimiser en moyenne les variations de l'écart entre l'état analysé et l'état vrai.

Pour construire ce type d'algorithme, il faut représenter mathématiquement l'incertitude sur les différentes sources d'informations. Cette incertitude peut être définie en mesurant (ou en supposant) les statistiques d'erreur³ d'observation et d'ébauche avec des probabilités. L'algorithme d'analyse peut alors être écrit pour que, formellement, l'erreur d'analyse soit, en moyenne, minimale dans une norme définie par l'utilisateur. L'analyse devient ainsi un problème d'optimisation.

Variables d'erreur

Les erreurs liées à l'ébauche et aux observations sont les écarts entre ces données et la représentation de l'état vrai du système. On définit ainsi l'**erreur d'ébauche** :

$$\epsilon^b = \mathbf{x}^b - \mathbf{x}^t(t_0), \quad (\text{II.1.14})$$

pour laquelle l'erreur de discrétisation n'est pas comprise.

On définit également l'**erreur d'observation** au temps t_i :

$$\epsilon_i^o = \mathbf{y}_i^o - \mathcal{H}_i[\mathbf{x}^t(t_i)], \quad (\text{II.1.15})$$

³D'après COHN [15], l'erreur peut être vue sous un 3^e angle : l'erreur liée aux équations du modèle. Ce dernier aspect des incertitudes considérées dans l'assimilation de données n'est pas utilisé dans ce travail de thèse et n'est donc pas détaillé. Le lecteur intéressé pourra se référer à VIDARD [101; 100] pour plus de renseignements sur la prise en compte de cette erreur et à TRÉMOLET [97] pour des développements plus récents.

qui contient l'erreur due au processus d'observation (ou erreur instrumentale), l'erreur dans la conception de \mathcal{H} et l'erreur de représentativité (ou l'erreur de discrétisation empêchant \mathbf{x}^t d'être l'image parfaite de l'état vrai).

Considérons \mathbf{x}^b et \mathbf{y}^o comme des variables aléatoires. La meilleure information sur ces écarts (ou erreurs) est donnée par la fonction de densité de probabilité calculée pour un très large nombre de réalisations de \mathbf{x}^b et \mathbf{y}^o . Cette fonction de probabilité dépend uniquement des processus responsables des erreurs. Pour une réalisation donnée, on ne connaît pas l'erreur commise mais on peut estimer les statistiques liées à cette erreur.

La moyenne de ces erreurs est qualifiée de **biais** et représente une erreur systématique qui peut par exemple être due à une dérive du modèle ou à une défaillance instrumentale dans les observations. Ce biais est de même nature statistique que l'ébauche ou le vecteur d'observations. Ainsi les transformations linéaires appliquées sur l'ébauche ou sur le vecteur des observations (telles que les transformations spectrales) peuvent être appliquées aux vecteurs biais.

En pratique, on travaille fréquemment en considérant des biais nuls. En effet, si les erreurs d'observation ne sont pas nulles en moyenne, alors cette moyenne est soustraite aux mesures de sorte que l'espérance mathématique de ϵ soit égale à zéro. On dit que l'on **débiaise** les observations. De même l'ébauche peut toujours être modifiée pour que les erreurs soient nulles en moyenne. Cela se traduit par les équations suivantes :

$$E[\epsilon^b] = 0, \quad (\text{II.1.16})$$

$$E[\epsilon_i^o] = 0, \forall i \in [0, N], \quad (\text{II.1.17})$$

où la notation $E[.]$ représente l'opérateur d'espérance mathématique et $N + 1$ représente le nombre d'instantanés où des vecteurs d'observations sont assimilés.

Covariances d'erreur

La majorité des techniques d'assimilation de données utilisent l'hypothèse que les biais sont nuls. Elles s'attachent en revanche à travailler sur les statistiques des écarts à l'état vrai. L'information pertinente pour ces techniques est contenue dans les **variances** et les **covariances** des erreurs d'ébauche et d'observation. On définit ainsi la **matrice de covariance d'erreur d'ébauche** \mathbf{B} :

$$\mathbf{B} = E[\epsilon^b \epsilon^{bT}], \quad (\text{II.1.18})$$

et également la **matrice de covariance d'erreur d'observation** \mathbf{R}_i au temps t_i :

$$\mathbf{R}_i = E[\epsilon_i^o \epsilon_i^{oT}] \quad (\text{II.1.19})$$

Sous l'hypothèse que les erreurs d'observation sont décorréliées en temps, *i.e.* $E[\epsilon_i^o \epsilon_j^{oT}] = 0, \forall i \neq j$, nous avons donc que : $\mathbf{R} = \text{diag}(\dots, \mathbf{R}_i, \dots)$.

Les éléments diagonaux des matrices \mathbf{B} et \mathbf{R} correspondent aux variances de l'erreur pour chaque élément de la variable. Les termes hors de la diagonale correspondent aux covariances croisées entre chaque paire d'éléments de la variable. Ainsi, pour un vecteur d'ébauche de dimension n , en notant (e_1, e_2, \dots, e_n) l'erreur d'ébauche, on peut écrire :

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \text{var}(e_1) & \dots & \text{cov}(e_1, e_n) \\ & \ddots & \\ \vdots & \text{var}(e_j) & \vdots \\ & & \ddots & \\ \text{cov}(e_n, e_1) & \dots & & \text{var}(e_n) \end{bmatrix} \quad (\text{II.1.20})$$

où les indices $1, 2, \dots, j, \dots, n$ font référence aux dimensions de l'ébauche. Comme annoncé à la fin de la section 1.1, on obtient une matrice \mathbf{B} de dimension $n \times n$. Nous verrons dans la suite (section 3.2) comment éviter la construction explicite d'une matrice avec une telle dimension par la **modélisation**.

1.3 La résolution du problème inverse

1.3.1 Récapitulatif

La FIG. II.1.3 réillustre le principe d'optimisation de la condition initiale de la FIG. II.1.1 en utilisant le formalisme mathématique introduit jusqu'à présent. Les incertitudes sur les données sont directement intégrées dans le processus d'assimilation et donc au problème inverse défini par le système d'EQS. II.1.11.

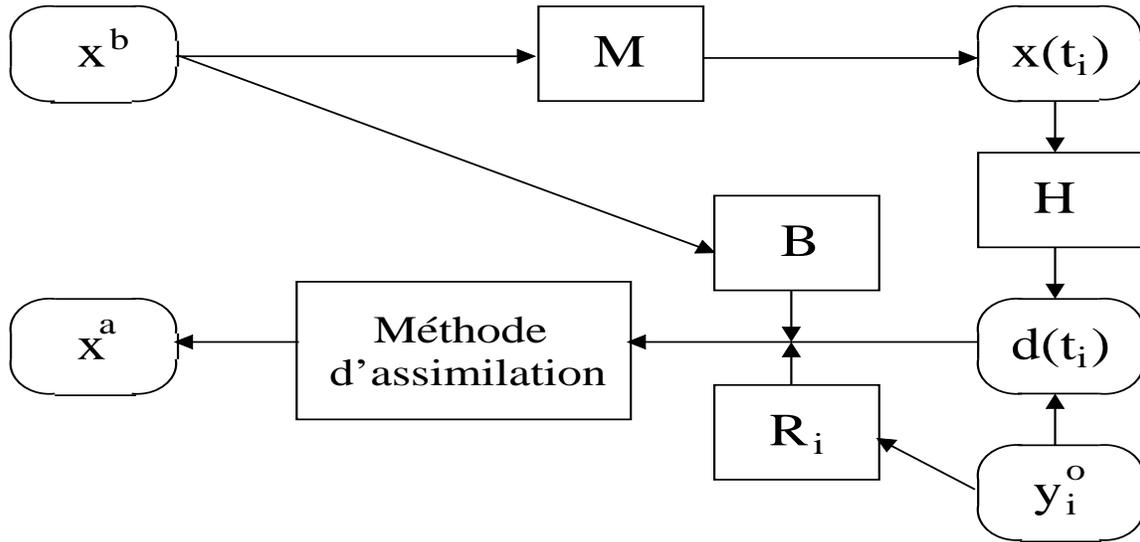


Fig. II.1.3 : Principe de l'optimisation de la condition initiale d'un modèle mathématique par l'assimilation de données, avec formalisme mathématique et introduction des incertitudes. L'indice i indique que le vecteur, ou la matrice, est disponible au temps $t_i, \forall i \in [0, N]$.

1.3.2 Vers les méthodes variationnelles

Si la fonctionnelle \mathcal{F} de l'EQ. II.1.8 est linéaire, alors on note \mathbf{F} l'opérateur linéarisé de \mathcal{F} et l'EQ. II.1.8 se réécrit : $\mathbf{F}[\mathbf{X}] = \mathbf{Y}$. Si de plus \mathbf{F} est inversible alors le problème admet une solution qui s'écrit : $\mathbf{X} = \mathbf{F}^{-1}[\mathbf{Y}]$. Cependant, les problèmes résolus par les méthodes inverses n'ont pas nécessairement de solution exacte au sens mathématique strict. Si \mathcal{F} est non-linéaire, on utilise alors des méthodes d'optimisation pour approcher la solution du problème inverse. Dans cette thèse, nous nous contentons d'introduire le type de méthodes que nous avons utilisé : les méthodes variationnelles. D'autres types de méthodes existent tels que la méthode des moindres carrés, de l'estimateur du maximum de vraisemblance ou encore du minimum de la variance de l'estimateur d'erreur. Toute personne souhaitant approfondir ces autres méthodes est encouragée à consulter MASSART [67] qui les introduit de manière didactique.

Nous supposons que les erreurs d'ébauche et d'observation sont indépendantes ($E[\epsilon_i^o \epsilon_j^{bT}] = 0, \forall i \in [0, N]$, où $N + 1$ représente le nombre d'instantanés où des vecteurs d'observations sont

assimilés) et que les erreurs d'observation sont décorréélées en temps. Ce sont deux hypothèses fortes que l'on gardera tout au long des études de cette thèse. Soit \mathbf{x} une variable aléatoire. Nous définissons une fonction coût \mathbf{J} qui exprime, à chaque instant t_i , l'écart, pondéré par \mathbf{R}_i^{-1} , entre les observations \mathbf{y}_i^o et la représentation du modèle $\mathbf{x}(t_i)$ dans l'espace des observations (par l'opérateur \mathcal{H}) d'une part, et l'écart, pondéré par \mathbf{B}^{-1} , entre l'état du modèle à l'instant t_0 et l'ébauche \mathbf{x}^b d'autre part :

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}(t_0) - \mathbf{x}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}(t_0) - \mathbf{x}^b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (\mathcal{H}_i[\mathbf{x}(t_i)] - \mathbf{y}_i^o)^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathcal{H}_i[\mathbf{x}(t_i)] - \mathbf{y}_i^o). \quad (\text{II.1.21})$$

Les matrices \mathbf{R}_i^{-1} et \mathbf{B}^{-1} peuvent être interprétées comme la confiance sur les observations et la confiance sur l'ébauche.

Dans les méthodes variationnelles, l'analyse est la solution \mathbf{x}^a qui **minimise** la fonction coût \mathbf{J} . Dans ce but, on peut calculer explicitement le minimum de \mathbf{J} , qui peut par exemple être obtenu en annulant son **gradient** par rapport à \mathbf{x} :

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \mathbf{x}} = 0. \quad (\text{II.1.22})$$

On peut également calculer une solution approchée en minimisant \mathbf{J} . Usuellement, des algorithmes déterministes sont utilisés pour minimiser \mathbf{J} . Ces algorithmes peuvent nécessiter le calcul du gradient de \mathbf{J} à chaque itération de la minimisation.

Nous avons à présent tout le formalisme nécessaire pour présenter différentes variantes de l'assimilation variationnelle.

1.3.3 Quelques méthodes variationnelles classiques

Branche de l'analyse fonctionnelle s'intéressant à la recherche d'extrema de fonctions, les premiers calculs variationnels ont été réalisés il y a environ 2000 ans par un sculpteur grec du nom de Zenodore. Puis le calcul des variations réapparut au XVII^e siècle avec les frères Jakob et Johann Bernoulli donnant naissance à la théorie du calcul des variations, approfondie plus tard par Euler et Lagrange.

L'approche variationnelle moderne fut introduite par SASAKI [83; 84] dans ses travaux de 1958 et 1970. Elle est ensuite développée par les travaux de LEWIS ET DERBER [59] en 1985 qui proposent une alternative aux méthodes traditionnelles de minimisation. En 1986 LE DIMET ET TALAGRAND [24] proposent deux nouveaux algorithmes pour les problèmes de minimisation non-linéaires. Puis en 1987 COURTIER ET TALAGRAND [17] montrent que l'équation du modèle linéaire-tangent suffit à décrire l'évolution sur 24 heures des erreurs de prévision dans le cas de l'assimilation d'observations météorologiques. Citons enfin THACKER ET LONG [94] qui, en 1988, décrivent de manière complète les méthodes adjointes.

La méthode 4D-Var

La FIG. II.1.4 illustre le fonctionnement général de la méthode **4D-Var**. Avec cette méthode, on effectue une analyse sur une fenêtre temporelle en tenant compte de l'ensemble des $N + 1$ instants où l'on dispose de vecteurs d'observations dans cette fenêtre (voir par exemple LORENC [64] ou THÉPAUT ET COURTIER [95]). L'état de l'ébauche \mathbf{x}^b , défini à l'instant initial t_0 , est intégré par le modèle numérique jusqu'à l'instant t_N afin de décrire la **trajectoire** de l'ébauche $\{\mathbf{x}^b(t_i), \forall i \in [0, N]\}$. À chaque instant t_i , on calcule l'innovation : $\mathbf{d}_i = \mathbf{y}_i^o - \mathcal{H}[\mathbf{x}^b(t_i)]$.

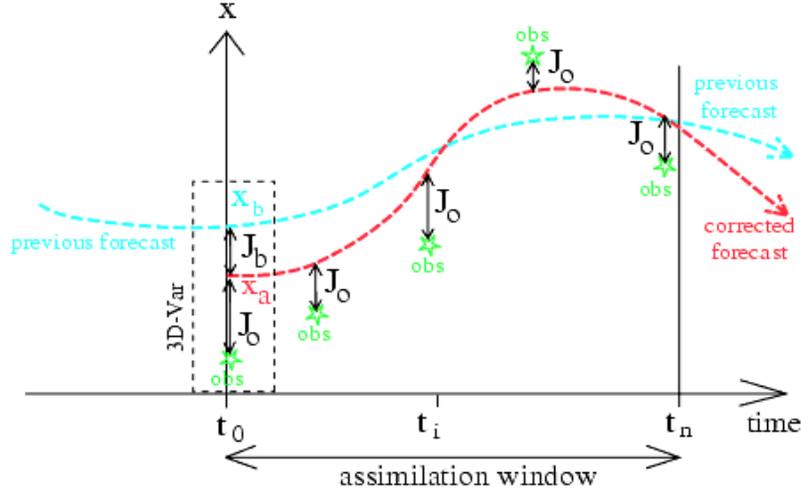


Fig. II.1.4 : Cycle d'assimilation 4D-Var dans un système de prévision numérique. Dans la fenêtre d'assimilation $[t_0, t_n]$ une analyse 4D-Var est effectuée pour assimiler les observations en utilisant comme ébauche \mathbf{x}^b une prévision à courte échéance issue de l'analyse la plus récente. Cela réactualise la trajectoire du modèle initialement issue de l'ébauche. Extrait de BOUTTIER ET COURTIER [5].

L'analyse fournit un état $\mathbf{x}^a(t_0)$ au début de la fenêtre d'assimilation qui, propagé par le modèle numérique, donne la trajectoire analysée optimale pour l'ensemble des \mathbf{y}_i^o et $\mathbf{x}^b(t_i)$, compte tenu de leurs erreurs respectives. L'état analysé à la fin de la fenêtre d'assimilation décrit l'état de l'ébauche pour la prochaine étape d'analyse (sur la fenêtre temporelle suivante). Ainsi la trajectoire analysée est continue entre chaque temps d'observation mais discontinue entre chaque fenêtre d'assimilation.

En notant $\mathcal{M}(t_0, t_i) = \mathcal{M}_{0 \rightarrow i}$ et $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(t_0)$, l'Eq. II.1.6 s'écrit :

$$\forall i \in [0, N], \mathbf{x}(t_i) = \mathcal{M}_{0 \rightarrow i}[\mathbf{x}_0]. \quad (\text{II.1.23})$$

Ainsi on cherche à minimiser $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{J}_b(\mathbf{x}_0) + \mathbf{J}_o(\mathbf{x}_0), \quad (\text{II.1.24})$$

avec

$$\mathbf{J}_b(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b), \quad (\text{II.1.25})$$

et

$$\mathbf{J}_o(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (\mathcal{H}_i[\mathcal{M}_{0 \rightarrow i}[\mathbf{x}_0]] - \mathbf{y}_i^o)^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathcal{H}_i[\mathcal{M}_{0 \rightarrow i}[\mathbf{x}_0]] - \mathbf{y}_i^o). \quad (\text{II.1.26})$$

Comme nous l'avons évoqué précédemment, l'état optimal \mathbf{x}^a peut être obtenu par minimisation de la fonction coût \mathbf{J} , un processus qui peut nécessiter le calcul de son gradient. La seule possibilité de déterminer numériquement le gradient de \mathbf{J} avec un coût acceptable est l'utilisation des équations adjointes du modèle (TALAGRAND ET COURTIER [92]). Le gradient s'écrit :

$$\nabla \mathbf{J}(\mathbf{x}) = \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^b) + \sum_{i=0}^N \mathbf{M}_{0 \rightarrow i}^* \mathbf{H}_i^* \mathbf{R}_i^{-1} (\mathcal{H}_i[\mathcal{M}_{0 \rightarrow i}[\mathbf{x}]] - \mathbf{y}_i^o), \quad (\text{II.1.27})$$

où $\mathbf{M}_{0 \rightarrow i}^*$ et \mathbf{H}_i^* sont les opérateurs adjoints des opérateurs linéarisés $\mathbf{M}_{0 \rightarrow i}$ et \mathbf{H}_i . $\mathbf{M}_{0 \rightarrow i}$ est l'opérateur linéarisé de $\mathcal{M}_{0 \rightarrow i}$:

$$\mathbf{M}_{0 \rightarrow i} = \frac{\partial \mathcal{M}_{0 \rightarrow i}}{\partial \mathbf{x}}. \quad (\text{II.1.28})$$

\mathbf{H}_i est l'opérateur linéarisé de \mathcal{H}_i :

$$\mathbf{H}_i = \frac{\partial \mathcal{H}_i}{\partial \mathbf{x}}. \quad (\text{II.1.29})$$

Les opérateurs adjoints doivent vérifier la relation suivante :

$$(\mathbf{d}_i, \mathbf{Ox}) = (\mathbf{O}^* \mathbf{d}_i, \mathbf{x}), \quad (\text{II.1.30})$$

où \mathbf{O} représente $\mathbf{M}_{0 \rightarrow i}$ ou \mathbf{H}_i , et la notation $(., .)$ représente le produit scalaire. Leur développement n'est pas immédiat mais, en assimilation variationnelle, le calcul des opérateurs adjoints constitue la seule façon pratique d'implémenter les méthodes. Leur utilisation a été développée par LIONS [60] dans les applications de la théorie du contrôle optimal et étendue progressivement dans d'autres domaines.

Avec la méthode 4D-Var, nous utilisons la variable d'état \mathbf{x} comme variable de contrôle. Or, comme nous l'avons évoqué précédemment (*c.f.* section 1.1), il est possible de changer de variable de contrôle afin de réduire le coût numérique du processus d'assimilation.

La méthode 4D-Var incrémentale

Dans les années 1990, l'un des principaux objectifs de l'implémentation opérationnelle était de réduire le coût de la méthode 4D-Var à un niveau acceptable en temps de calcul. Par exemple COURTIER *et al.* [18] rapporte qu'en 1994 au CEPMMT, l'assimilation sur une fenêtre de 24 heures nécessite autant de temps de calcul que l'intégration du modèle direct sur une période de 100 jours. En utilisant une variante de la méthode 4D-Var appelée la **méthode 4D-Var incrémentale**, les travaux de COURTIER *et al.* [18] et RABIER *et al.* [78] ont rendu le 4D-Var opérationnel pour la prévision météorologique au CEPMMT.

Chaque itération de la minimisation de la fonction coût nécessite l'intégration du modèle direct. Le modèle direct étant non-linéaire, cette opération est coûteuse. En effet les non-linéarités des modèles atmosphériques peuvent conduire à des fonctions coûts complexes et donc à des minimisations très longues. Pour réduire ce coût, on cherche à utiliser un modèle linéarisé autour d'un état à définir.

L'approche 4D-Var incrémentale consiste à considérer comme variable de contrôle l'écart (au temps initial dans notre cas) entre l'état du système et l'ébauche :

$$\delta \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}(t_0) - \mathbf{x}^b. \quad (\text{II.1.31})$$

En supposant que l'ébauche est une "bonne" approximation *a priori* de l'état optimal, alors l'incrément $\delta \mathbf{x}(t_0)$ est petit. On linéarise alors au 1^{er} ordre l'opérateur non-linéaire \mathcal{M} au voisinage de l'ébauche de sorte que pour tout état $\mathbf{x}(t_i)$, à chaque instant t_i de la fenêtre temporelle d'assimilation, on a :

$$\mathbf{x}(t_i) = \mathbf{x}^b(t_i) + \mathbf{M}_{0 \rightarrow i} \delta \mathbf{x}(t_0). \quad (\text{II.1.32})$$

L'opérateur d'observation \mathcal{H} est aussi linéarisé au 1^{er} ordre et en l'appliquant à l'Eq. II.1.32, on a :

$$\mathcal{H}_i[\mathbf{x}(t_i)] = \mathcal{H}_i[\mathbf{x}^b(t_i)] + \mathbf{H}_i \mathbf{M}_{0 \rightarrow i} \delta \mathbf{x}(t_0). \quad (\text{II.1.33})$$

Ainsi, en posant $\delta \mathbf{x}_0 = \delta \mathbf{x}(t_0)$, on cherche à minimiser la fonction $\mathbf{J}(\delta \mathbf{x}_0)$:

$$\mathbf{J}(\delta \mathbf{x}_0) = \frac{1}{2} \delta \mathbf{x}_0^T \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x}_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (\mathbf{H}_i \mathbf{M}_{0 \rightarrow i} \delta \mathbf{x}_0 - \mathbf{d}_i)^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{H}_i \mathbf{M}_{0 \rightarrow i} \delta \mathbf{x}_0 - \mathbf{d}_i), \quad (\text{II.1.34})$$

avec $\mathbf{d}_i = y_i^o - \mathcal{H} \mathbf{x}^b(t_i)$. L'approche **4D-Var incrémentale** offre donc l'avantage de rendre la fonction coût quadratique, ce qui garantit l'identification d'un minimum unique. Quand il est nécessaire de calculer le gradient de \mathbf{J} , son expression est :

$$\nabla_{\delta \mathbf{x}_0} \mathbf{J}(\delta \mathbf{x}_0) = \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x}_0 + \sum_{i=0}^N \mathbf{M}_{0 \rightarrow i}^* \mathbf{H}_i^* \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{H}_i \mathbf{M}_{0 \rightarrow i} \delta \mathbf{x}_0 - \mathbf{d}_i). \quad (\text{II.1.35})$$

Le déroulement de la méthode 4D-Var incrémentale peut être décrit comme suit : à chaque itération de la minimisation, le terme de la fonction coût lié aux observations est calculé en propageant l'incrément dans le temps avec le modèle linéaire-tangent ; le calcul du gradient de la partie relative aux observations nécessite l'intégration de l'adjoint du modèle linéaire-tangent sur toute la fenêtre d'assimilation ; à la fin de la minimisation, l'incrément d'analyse obtenu est ajouté à l'ébauche ; l'état analysé à l'instant initial de la fenêtre d'assimilation est ensuite propagé par le modèle non-linéaire jusqu'à la fin de la fenêtre d'assimilation. On obtient ainsi la trajectoire $\mathbf{x}^a(t)$.

En pratique, il est possible de prendre en compte les faibles non-linéarités des opérateurs \mathcal{M} et \mathcal{H} en mettant à jour la trajectoire de référence au cours de la minimisation : on met à jour $\mathbf{x}(t_0)$ avec $\delta \mathbf{x}_0$ issu de la minimisation puis on propage cet état par \mathcal{M} et l'on procède à une nouvelle minimisation. Ce procédé connu sous le nom de **boucle externe** est détaillé dans le chapitre 2 de la partie III. Un de ses intérêts majeurs provient du choix des modèles linéaires \mathbf{M} et \mathbf{H} dans les premières boucles externes qui sont généralement des versions simplifiées de la linéarisation des opérateurs \mathcal{M} et \mathcal{H} : avec une physique simplifiée, des phénomènes négligés ou encore des maillages plus grossiers. De plus, cette simplification peut considérablement faciliter l'écriture de l'adjoint du modèle.

La méthode 3D-Var avec FGAT

Avec la méthode 4D-Var incrémentale on peut utiliser des modèles linéaires simplifiés. Ceux-ci sont couramment obtenus en omettant certains processus physiques ou en utilisant une plus faible résolution spatiale (COURTIER *et al.* [18]). Le modèle linéaire le plus simple est la matrice identité. Le choix de la matrice identité à la place d'un modèle linéarisé de prévision pour propager l'incrément constitue la base de la méthode 3D-Var avec **First Guess at Appropriate Time**, que l'on appelle aussi méthode **3D-FGAT**. Cette simplification est particulièrement intéressante car les intégrations des modèles adjoint et linéaire-tangent sont majoritairement responsables du coût de calcul total de la méthode 4D-Var incrémentale (GAUTHIER *et al.* [38]).

Avec l'hypothèse que $\mathbf{M} = \mathbf{I}$, les EQS. II.1.34 et II.1.35 de la fonction coût et de son gradient pour la méthode 4D-Var incrémentale se réécrivent :

$$\mathbf{J}(\delta \mathbf{x}) = \frac{1}{2} \delta \mathbf{x}^T \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x} + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (\mathbf{H}_i \delta \mathbf{x} - \mathbf{d}_i)^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{H}_i \delta \mathbf{x} - \mathbf{d}_i) \quad (\text{II.1.36})$$

$$\nabla_{\delta \mathbf{x}} \mathbf{J}(\delta \mathbf{x}) = \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x} + \sum_{i=0}^N \mathbf{H}_i^* \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{H}_i \delta \mathbf{x} - \mathbf{d}_i) \quad (\text{II.1.37})$$

Par conséquent, il n'y a pas besoin de développer l'adjoint du modèle linéaire-tangent, ce qui est un avantage non-négligeable car pour beaucoup d'applications, il n'est pas immédiatement ou facilement disponible. Notons que l'innovation est toujours calculée avec le modèle direct non-linéaire.

Bien que les ordinateurs soient de plus en plus performants, avoir une méthode d'assimilation moins coûteuse que le 4D-Var est toujours pertinent. Par exemple, la méthode 3D-FGAT peut être utile pour fournir des réanalyses de la composition chimique atmosphérique sur de longues périodes. Ce genre d'étude permet d'estimer les tendances et de détecter la signature du changement climatique sur la composition de l'atmosphère.

2

Le modèle Mocage

Quel que soit le degré de complexité de la méthode d'assimilation de données utilisée, elle ne produira pas de bonnes analyses si elle ne s'appuie pas sur un modèle de qualité. Pour les études de chimie atmosphérique, les principaux processus impliqués qu'un modèle doit représenter, au moins de façon minimale, sont illustrés par la FIG. II.2.1. Les modèles atmosphériques peuvent être à aire limitée ou globaux, méso-échelle ou d'échelle synoptique, couplés à des modèles de circulation océanique, à des modèles 2D des propriétés de la surface terrestre ou océanique, etc...

Comme nous sommes intéressés en particulier par l'ozone en tant qu'espèce filtrant le rayonnement UV, nous choisissons de travailler avec un modèle global qui représente notamment la stratosphère (car c'est dans cette couche de l'atmosphère que se situe la majeure partie de l'ozone, *c.f.* partie I). Un aspect déterminant dans le choix du modèle utilisé est la comparaison du temps de vie chimique des espèces atmosphériques auxquelles on s'intéresse par rapport au temps de vie dynamique des espèces dans la zone d'intérêt. Dans le cas de l'étude de l'ozone (O_3) dans la stratosphère, où se produisent des phénomènes dynamiques d'échelle synoptique, un modèle de chimie-transport convient.

2.1 Les modèles de chimie-transport

Les **modèles de chimie-transport** (MCT) simulent la formation, le transport et les sources et les puits des principaux composés chimiques de l'atmosphère. L'état de l'art considère 50 à 100 espèces chimiques. De l'ordre de 150 à 200 réactions chimiques en phase gazeuse et hétérogène sont généralement prises en compte entre celles-ci. Le MCT peut être couplé directement avec un modèle de circulation générale (MCG) et ainsi fonctionner en mode *on-line*. Dans ce cas, le MCG fournit au MCT, à chaque pas de temps du couplage, les paramètres météorologiques nécessaires au calcul du transport des traceurs et, en retour, le MCT peut fournir au MCG les distributions des espèces actives sur le bilan radiatif (H_2O , O_3 , CO_2 ...) pour l'évaluation des nouveaux paramètres météorologiques. Dans le mode forcé (ou *off-line*), les paramètres météorologiques sont fournis à partir de champs précalculés par un MCG ou d'analyses. Les données chimiques au sein du MCG proviennent alors des valeurs climatologiques pour les espèces actives ou de schémas linéaires.

L'évolution de la distribution des espèces chimiques est simulée dans les modèles numériques par intégration de l'équation de continuité :

$$\frac{\partial r}{\partial t} = (P_\phi - L_\phi) + (P_\chi - L_\chi r) - \vec{\nabla} \cdot (r\vec{V}), \quad (\text{II.2.1})$$

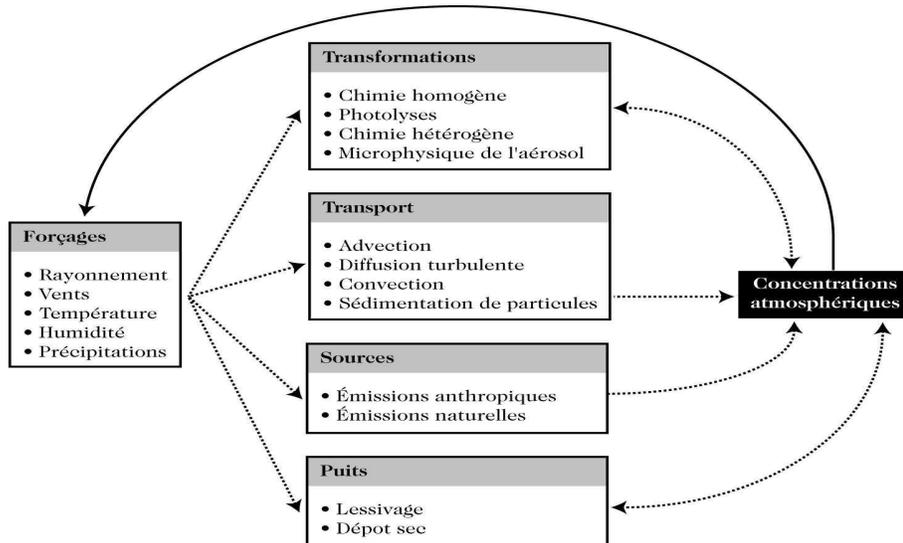


Fig. II.2.1 : Principaux processus impliqués dans l'évolution spatiale et temporelle des distributions d'espèces chimiques dans l'atmosphère. L'ensemble de ces processus doit être représenté, au moins de façon minimale, dans un modèle de physique-chimie de l'atmosphère. Les flèches à double-sens indiquent que la quantification des transformations et des puits nécessite la prise en compte des concentrations des espèces. Extrait de DELMAS *et al.* [22].

où r est le rapport de mélange de l'espèce considérée.

L'EQ. II.2.1 traduit le fait qu'une variation du rapport de mélange d'un constituant chimique résulte de la production/perte par la physique et la chimie et des phénomènes de transport. Les sources et les puits physiques sont représentés respectivement par P_ϕ et L_ϕ . Le terme de perte photochimique est conventionnellement écrit sous la forme du produit d'une fréquence de perte L_χ en s^{-1} et du rapport de mélange r . Le terme de production chimique en s^{-1} est P_χ , généralement indépendant de r . Le transport est quand à lui principalement advectif et dépend de la vitesse du vent \vec{V} . Si les processus physiques et chimiques sont faibles, le rapport de mélange du traceur se conserve au sein d'une particule d'air le long d'une trajectoire. Il peut alors servir à caractériser les mouvements atmosphériques, tout comme la température potentielle ou le tourbillon potentiel.

2.2 Les caractéristiques principales de MOCAGE

Dans cette thèse, nous avons utilisé le **MOdèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle** (MOCAGE, JOSSE *et al.* [49] et TEYSSEDE *et al.* [93]) développé par le Centre National de Recherches Météorologiques (CNRM) de Météo-France. Le développement de ce MCT tridimensionnel en points de grille a été initié en 1999. C'est un modèle multi-échelles (plusieurs domaines horizontaux imbriqués), stratosphérique et troposphérique. Il fait suite au modèle REPROBUS développé en collaboration avec le National Center for Atmospheric Research (NCAR) et utilisé au CNRM depuis 1991 pour étudier la chimie de la stratosphère et son interaction avec le climat (LEFÈVRE *et al.* [58]). MOCAGE couvre une large gamme d'objectifs scientifiques, depuis l'étude des interactions entre la chimie et le climat, jusqu'à la modélisation de la chimie troposphérique à l'échelle régionale. Il est largement impliqué dans des initiatives nationales comme Prév'Air (HONORÉ *et al.* [43]) et internationales comme les projets *Global Monitoring for Environment and Security* (GEMS, HOLLINGSWORTH *et al.* [41]) et *Monitoring Atmospheric*

Composition and Climate (MACC, EL AMRAOUI *et al.* [3]) visant à mettre en place une capacité opérationnelle de prévision et d'analyse/ré-analyse de la composition chimique de l'atmosphère.

La coordonnée verticale de MOCAGE est la coordonnée hybride sigma-pression, de telle sorte que la couche la plus proche de la surface épouse le relief et que les couches de la haute atmosphère soient parallèles. Nous utilisons la version de MOCAGE avec 60 niveaux verticaux allant de la surface à 0.1 hPa comme représenté sur la FIG. II.2.2. Le maillage vertical est fin

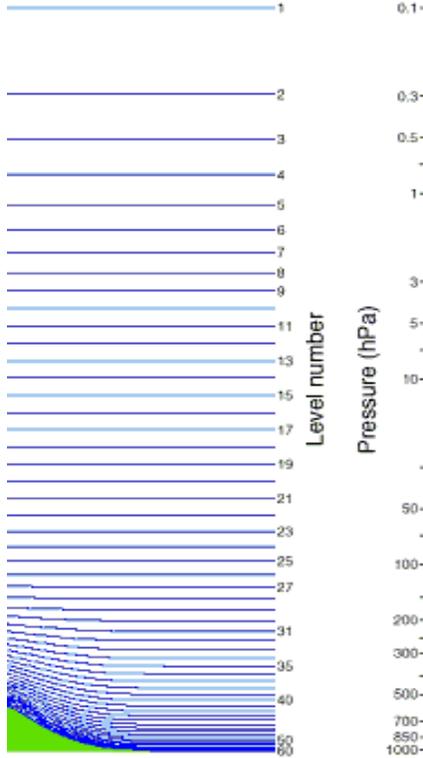


Fig. II.2.2 : La répartition de la grille verticale de MOCAGE dans sa version à 60 niveaux.

à la surface terrestre (avec 7 niveaux dans la couche limite atmosphérique) et de plus en plus grossier jusqu'à la basse mésosphère. Pour un domaine global, MOCAGE est usuellement utilisé avec une grille horizontale régulière de 2° par 2° ou encore avec une grille horizontale Gaussienne T42 (environ 2.8° par 2.8° à l'équateur).

La partie dynamique de la modélisation peut être séparée dans MOCAGE en deux parties : le transport résolu et le transport sous-maille. Pour son schéma de transport résolu, MOCAGE est basé sur la représentation semi-Lagrangienne de RASCH ET WILLIAMSON [79]. Quant au transport sous maille, la convection et la diffusion turbulente peuvent être prises en compte. Ces phénomènes sont en effet capables de transporter des constituants chimiques depuis la surface jusque dans la basse stratosphère en très peu de temps. Dans nos études, nous négligeons la convection ; mais notons que dans MOCAGE, celle-ci peut être activée à l'aide du schéma de TIEDTKE [96] ou bien du schéma de BECHTOLD *et al.* [4]. La diffusion turbulente est basée sur le schéma de LOUIS [65]. Ces schémas sont détaillés et évalués dans JOSSE [48] et JOSSE *et al.* [49].

En tant que MCT, MOCAGE nécessite des champs météorologiques pour alimenter son schéma d'advection semi-Lagrangien (par exemple le vent pour le transport) et ses paramétrisations physiques et chimiques (par exemple la température utilisée pour le calcul des vitesses

des réactions chimiques). Pour les études menées dans cette thèse, nous utilisons MOCAGE en mode forcé. Habituellement, les champs de vent, température, pression et humidité proviennent du modèle *Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle* (ARPEGE) ou du modèle *Integrated Forecast System* (IFS) du CEPMMT. Les forçages peuvent être fournis sur une grille horizontale différente de celle de MOCAGE et donc être interpolés. En conséquence, la vitesse verticale du vent doit être recalculée pour s'assurer de la non-divergence du champ de vitesse, condition indispensable pour conserver la masse des constituants chimiques.

MOCAGE décrit également l'évolution chimique d'un certain nombre d'espèces et peut notamment considérer, selon l'application, les 3 schémas chimiques suivants :

- le schéma *Reactive Processes Ruling the Ozone Budget in the Stratosphere* (REPROBUS) pour la stratosphère, qui est un schéma relativement rapide (38 espèces transportées et 16 espèces à courte durée de vie) mais avec une bonne prise en compte de la chimie stratosphérique ;
- le schéma RACMOBUS⁴, regroupant les schémas *Regional Atmospheric Chemistry Mechanism* (RACM, schéma pour la troposphère, STOCKWELL *et al.* [86]) et REPROBUS, qui est un schéma complet (la chimie de 118 espèces est traitée, dont 89 ont une durée de vie assez longue pour être transportées) mais gourmand en ressources de calcul ;
- le schéma *REgional Lumped Atmospheric Chemical Scheme* (RELACS), qui est un schéma tropo-stratosphérique simplifié (avec 61 espèces transportées et 17 à courte durée de vie) adapté aux simulations climatiques.

Dans la partie suivante, nous présentons un quatrième schéma chimique : le schéma chimique linéaire de l'ozone, dit **schéma Cariolle**, qui est utilisé dans ce travail de thèse.

Des descriptions complémentaires de MOCAGE sont disponibles dans CATHALA [12] et MICHOU [72].

2.3 Le schéma chimique Cariolle

Pour les besoins de nos études, nous avons préféré le schéma linéaire Cariolle pour l'ozone. Ce schéma est en effet très stable et rapide et il convient bien à des études de l'ozone stratosphérique.

2.3.1 L'intérêt du schéma linéaire

Les cycles chimiques et photochimiques de production et de destruction de l'ozone stratosphérique font intervenir une quarantaine d'espèces différentes et une soixantaine de réactions chimiques. Afin de rendre compte de la chimie de l'ozone stratosphérique dans les modèles de grandes échelles en s'épargnant le calcul complet de ces réactions, une approche s'appuyant sur la linéarisation des systèmes photochimiques a été développée par CARIOLLE ET DÉQUÉ [10]. Cette approche apporte un gain en temps de calcul remarquable : par exemple, le schéma linéaire est en effet 500 fois plus rapide que le schéma chimique RELACS dans MOCAGE. Le schéma Cariolle a été initialement développé pour fournir des estimations de l'ozone aux MCG sans qu'ils aient besoin d'être couplés à un MCT. Il est actuellement utilisé dans les modèles ARPEGE-Climat de Météo-France, dans les modèles de prévision IFS du CEPMMT et dans certaines versions de l'Unified Model du Met Office. Ses bons résultats ont par la suite poussé à l'implémenter avec des MCT, et notamment avec MOCAGE.

Comme nous l'avons vu, les méthodes variationnelles d'assimilation de données nécessitent le développement de l'adjoint du modèle. Avec un MCT, ce développement peut être parti-

⁴RACM + REPROBUS => RACMOBUS.

culièrement coûteux car les processus chimiques sont complexes et fortement non-linéaires. La représentation linéaire de la chimie est alors une alternative extrêmement efficace car elle simplifie grandement l'inversion du schéma chimique. Cependant la chimie n'a pas été prise en compte dans le processus d'assimilation pour les études présentées dans cette thèse. En effet, pour l'ozone stratosphérique, celle-ci n'a que peu d'effet sur les fenêtres d'assimilation que nous considérons.

2.3.2 Description

Le schéma Cariolle consiste en la linéarisation des puits et sources photochimiques de l'ozone au moyen de coefficients de relaxation calculés par le MODèle BIDImensionnel de Chimie (Mobic). Mobic est un modèle en points de grille bidimensionnel (latitude/pression) de photochimie stratosphérique (CARIOLLE [9]). Le taux de variation P-L de l'ozone, P étant le taux de production et L le taux de destruction, est ainsi linéarisé autour d'une atmosphère de référence et fonction de la température T (dépendance des constantes cinétiques), du rapport de mélange d'ozone r_{O_3} et de la quantité intégrée d'ozone au-dessus du point considéré Σ (dépendance du flux local UV). L'équation de continuité de l'ozone se développe ainsi :

$$\frac{dr_{O_3}}{dt} = A_1 + A_2(r_{O_3} - A_3) + A_4(T - A_5) + A_6(\Sigma - A_7) + A_8r_{O_3}, \quad (\text{II.2.2})$$

où :

$$\begin{aligned} A_1 &= (P - L) \\ A_2 &= \partial(P - L)/\partial r_{O_3} \\ A_3 &= r_{O_3} \\ A_4 &= \partial(P - L)/\partial T \\ A_5 &= T \\ A_6 &= \partial(P - L)/\partial \Sigma \\ A_7 &= \Sigma \\ A_8 &: \text{terme de chimie hétérogène} \end{aligned} \quad (\text{II.2.3})$$

Dans cette thèse, nous avons utilisé la dernière version du schéma provenant de CARIOLLE ET TEYSSÈDRE [11]. En effet, depuis la version initiale en 1986, des observations globales de l'ozone ont été obtenues de manière plus précise, d'importants processus chimiques révélés et certains taux de réaction réévalués. Notamment le terme A_8 n'était pas introduit dans la version initiale car la chimie hétérogène de destruction de l'ozone n'était pas considérée à l'époque. Ce terme *ad-hoc* de destruction de l'ozone est activé lorsque les conditions de formation de nuages polaires stratosphériques sont rencontrées.

Ainsi, la dernière version du schéma Cariolle améliore considérablement les valeurs de production d'ozone dans la région du trou de la couche d'ozone. GEER *et al.* [40] a comparé ce schéma à d'autres schémas linéaires. Le schéma Cariolle génère de bonnes simulations dans la plupart de l'atmosphère, et plus particulièrement dans la troposphère libre et dans la stratosphère. Cependant, ses performances sont dégradées dans les couches limites de l'atmosphère (où il est usuellement remplacé par une relaxation vers une climatologie), dans la haute stratosphère et dans la mésosphère. Combinée avec l'assimilation de mesures stratosphériques, cette paramétrisation produit des résultats similaires à ceux obtenus pour l'assimilation avec un schéma chimique plus complet (GEER *et al.* [39]).

3

Le système Valentina

Le projet d'Assimilation de DONnées pour les MOdèles de Chimie de l'Atmosphère (ADO-MOCA) a été initié en 2005 avec pour but de mieux organiser la communauté scientifique française travaillant sur la chimie atmosphérique. Initialement, les membres impliqués décidèrent de se focaliser sur les deux domaines scientifiques suivants :

- la quantité d'ozone dans la stratosphère ;
- le transport des polluants dans la troposphère.

En raison du grand nombre d'outils disponibles, il fallut en choisir certains pour unifier les efforts de développement et de recherche. Le coupleur **Palm** (BUIS *et al.* [8]), développé au CERFACS, ainsi que le modèle Mocage et le modèle LMDz-INCA (FOLBERTH *et al.* [33]) de l'Institut Pierre-Simon Laplace (IPSL) ont été estimés les plus adaptés pour ce projet. Ce choix se justifiait notamment par l'existence du système **Mocage-Palm** (MASSART *et al.* [69]), développé conjointement par le CERFACS et Météo-France sous l'impulsion du projet européen *FP5 ASSimilation of Envisat Data* (ASSET) (LAHOZ *et al.* [56]).

Mocage-Palm est aujourd'hui devenu le système d'assimilation de données **Valentina** (MASSART *et al.* [70]), entièrement développé par le CERFACS et utilisé par le CERFACS, le CNRM et le Laboratoire d'Aérodynamique (LA). La flexibilité offerte par Palm fait de Valentina un système offrant de nombreuses options d'assimilation comme le choix du domaine analysé, de la méthode variationnelle, du type d'observations assimilées, de la représentation des covariances d'erreur d'ébauche, de l'utilisation de diagnostics sur les analyses, etc... Dans la suite, nous détaillons certains aspects de Valentina stratégiques dans ce travail de thèse. Et dans un premier temps, nous donnons quelques informations concernant le coupleur Palm.

3.1 Le coupleur Palm

L'origine du **Projet d'Assimilation par Logiciel Multi-méthodes** (Palm⁵) remonte à 1996. Le responsable du projet MERCATOR, en la personne de Philippe Courtier à l'époque, suggéra qu'un système d'assimilation de données pouvait être conçu et implémenté comme un couplage. Il fût ainsi développé un formalisme décrivant l'algorithme d'assimilation en terme de flux de données entre des **unités élémentaires** (LAGARDE et LAGARDE *et al.* [52], [53]). Ces dernières sont, par exemple, l'application de l'opérateur d'observation, le calcul des matrices de covariance d'erreur ou encore les opérations algébriques comme la somme de la partie de la fonction coût associée à l'ébauche avec elle associée aux observations. Le formalisme de Palm consiste en une notation standardisée et une représentation graphique des algorithmes.

⁵*c.f.* http://www.cerfacs.fr/globc/PALM_WEB pour des détails complémentaires au sujet de Palm.

Le logiciel Palm est un coupleur dynamique de codes parallèles qui s'appuie sur ce formalisme. Un coupleur est un outil logiciel qui va permettre au développeur d'exécuter et de faire communiquer un certain nombre de programmes qui n'ont pas été forcément prévus pour cela initialement. Palm permet ainsi d'implémenter des algorithmes de plus en plus complexes en utilisant les unités élémentaires déjà définies. Les unités propres au problème physique ne doivent qu'être légèrement modifiées pour être au formalisme Palm. Elles sont donc facilement adaptables à ce coupleur et deviennent indépendantes de l'algorithme d'assimilation, ce qui participe à la **modularité** de l'outil Palm. Les unités Palm sont assemblées *via* l'interface graphique **PrePalm** à l'intérieur de laquelle le programmeur définit en premier lieu l'algorithme de couplage : le nombre de composantes, les sections parallèles et séquentielles, les boucles, les exécutions conditionnelles et la gestion des ressources. Puis il décrit les communications entre les différentes unités. Le logiciel PrePalm fournit aussi un contrôle sur la synchronisation des communications, la gestion de la mémoire et le calcul parallèle, un dispositif de surveillance de l'exécution et un analyseur de performances. La FIG. II.3.1 représente la fenêtre graphique configurée pour les applications de cette thèse.

3.2 Modélisation des matrices de covariance d'erreur

La détermination exacte des matrices de covariance d'erreur telles que formulées dans les EQS. II.1.18 et II.1.19 suppose le calcul statistique de tous les termes d'erreur liés aux différences avec l'état vrai. Ceci est difficile, voir impossible, à mettre en œuvre puisque :

- l'état vrai \mathbf{x}^t est inconnu ;
- nous ne disposons pas de suffisamment d'information pour estimer statistiquement chaque terme ;
- même si nous disposions de ces termes ou de \mathbf{x}^t , il est difficilement envisageable de stocker de telles matrices (par exemple 10^{11} termes pour la matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} avec une grille horizontale Gaussienne T42 et 60 niveaux verticaux).

Dans la suite de cette section, nous allons voir quelles méthodes nous avons choisi dans Valentina afin de nous épargner le calcul direct des matrices de covariance d'erreur \mathbf{R} et \mathbf{B} .

3.2.1 Simplification de \mathbf{R}

Avec la configuration de Valentina utilisée dans ce travail de thèse, les hypothèses suivantes concernant les observations sont faites :

- les covariances entre différents instruments de mesure (si on assimile plusieurs jeux d'observation) sont supposés nulles ;
- les covariances temporelles d'une série d'observations d'un même instrument sont supposées négligeables ;
- les covariances spatiales (par exemple sur la verticale d'un profil) d'une série d'observations d'un même instrument peuvent être prises en compte.

En conséquence, seules subsistent les variances et les covariances spatiales des erreurs d'observation. La matrice de covariance d'erreur d'observation \mathbf{R} est donc **diagonale par blocs** et son inversion devient réalisable à faible coût. Dans Valentina, les valeurs de \mathbf{R} peuvent être calculées en % des valeurs des observations ou bien être lues dans un fichier de données.

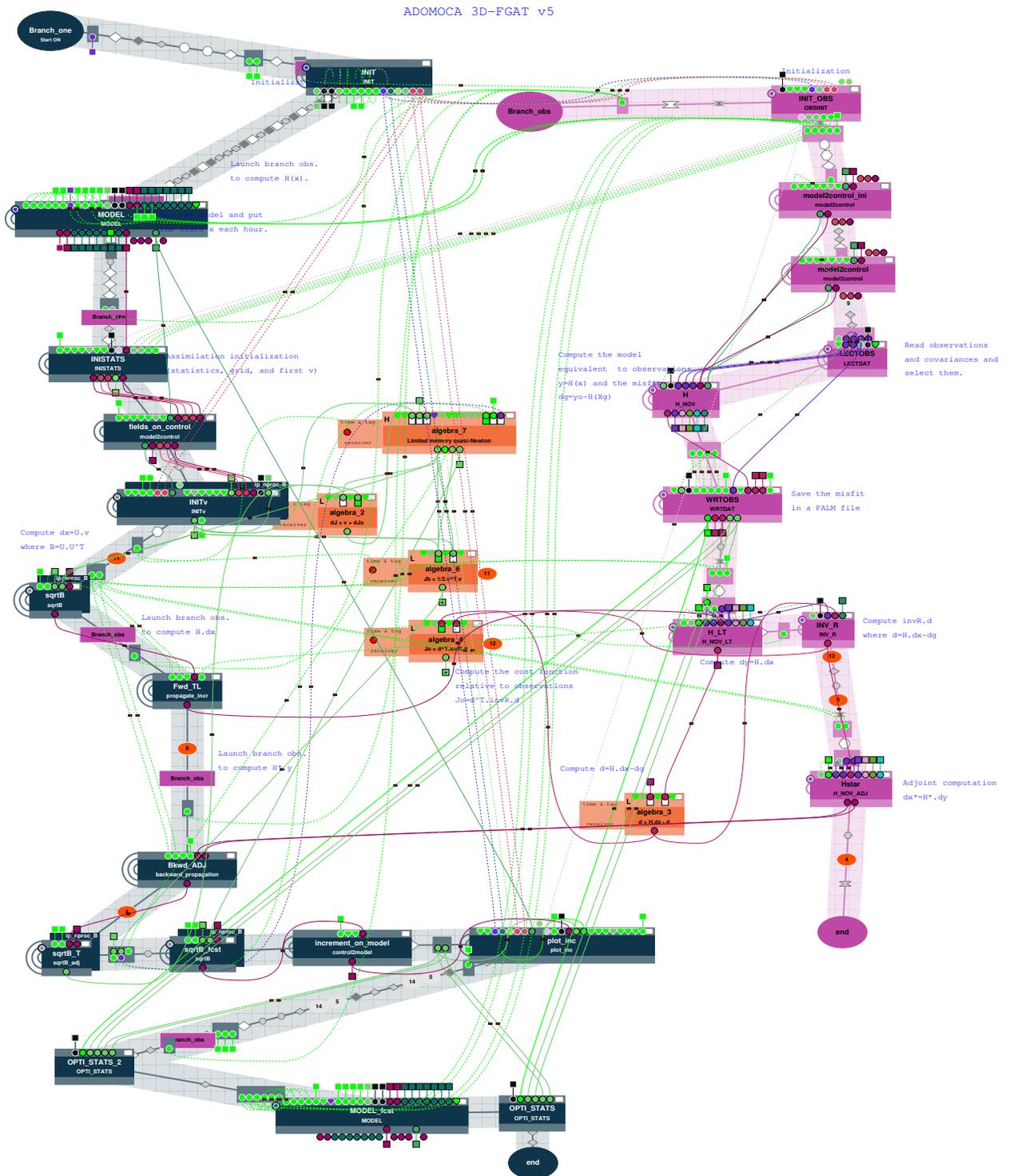


Fig. II.3.1 : Capture d'écran du canevas PrePalm. Les unités sont représentées par des boîtes dont la couleur est propre à chacun des processeurs sur lesquels les unités tournent. Au sommet de chaque boîte figurent les données d'entrées. Les données de sortie sont situées sur la base. Les communications sont représentées par des traits entre unités.

3.2.2 Décomposition de \mathbf{B}

Afin de fournir une analyse de qualité, on ne fait pas de telles hypothèses simplificatrices concernant la matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} . Dans Valentina, la matrice \mathbf{B} peut donc ne pas être diagonale. Cela permet de fournir une structure spatiale, que l'on souhaite physiquement cohérente, à l'information apportée au modèle. C'est une composante clé de tout système d'assimilation de données (KALNAY [51]). Nous allons maintenant voir comment la matrice \mathbf{B} est modélisée dans le système Valentina.

Dans les méthodes variationnelles que nous utilisons, à défaut d'utiliser une description exhaustive et exacte de la matrice \mathbf{B} , on peut **modéliser** l'opérateur $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{B}^{-1}\mathbf{x}$. On s'épargne ainsi le stockage de la matrice \mathbf{B} et on évite de calculer directement le produit $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x}$ qui est évalué à chaque itération de la minimisation de l'algorithme d'assimilation.

Comme pour l'EQ. II.1.20, nous considérons un vecteur d'erreur d'ébauche (e_1, e_2, \dots, e_n) de dimension n . Les termes hors diagonaux de la matrice \mathbf{B} de l'EQ. II.1.20 (les covariances $cov(e_i, e_j), \forall i \neq j \in [1, N]$) peuvent être transformés en **corrélations** (sous réserve que les variances correspondantes soient différentes de 0) :

$$\rho(e_i, e_j) = \frac{cov(e_i, e_j)}{\sqrt{var(e_i)var(e_j)}}, \quad (\text{II.3.1})$$

La première étape pour éviter le calcul direct de $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{x}$ consiste, lorsque c'est physiquement acceptable, à développer la matrice \mathbf{B} comme le produit :

$$\mathbf{B} = \mathbf{\Sigma}\mathbf{C}\mathbf{\Sigma}, \quad (\text{II.3.2})$$

où $\mathbf{\Sigma}$ correspond à la **matrice diagonale des écarts-types** et \mathbf{C} correspond à la **matrice de corrélation**. En l'absence de corrélation, la matrice \mathbf{B} se réduirait à une matrice diagonale qui est la variance d'erreur de chacune des variables. Cette variance quantifie l'amplitude de l'incertitude.

Cette hypothèse concernant la décomposition de \mathbf{B} est assez commune. Le calcul \mathbf{B} est alors scindé en deux parties bien distinctes : l'erreur contenue dans $\mathbf{\Sigma}$ et l'influence d'une variable sur les variables environnantes contenue dans \mathbf{C} , qui est modélisée. Dans ce travail de thèse, nous faisons l'hypothèse que le vecteur de contrôle est univarié (il ne contient que les concentrations en ozone du modèle) et l'influence d'une variable sur les autres est ainsi purement spatiale.

3.2.3 Représentation des variances

La matrice $\mathbf{\Sigma}$ de l'EQ. II.3.2 représente les écarts-types d'erreur d'ébauche de l'espèce assimilée en chaque point de grille du modèle. Différents choix pour spécifier cette matrice sont offerts par Valentina. Une première possibilité est d'imposer les écarts-types comme étant proportionnels à l'ébauche. Cela revient à dire que les erreurs sur l'état du champ varient avec sa concentration. Cette option est classique et constitue une estimation utile pour des tests d'assimilation préliminaires. Mais elle ne repose sur aucun postulat physique ni aucun diagnostic statistique. Pour s'assurer que l'on génère des analyses de bonne qualité, il est donc préférable d'imposer des écarts-types appropriés.

Ainsi Valentina offre également la possibilité de lire la matrice $\mathbf{\Sigma}$ dans un fichier de données préalablement généré. Ces données peuvent notamment être obtenues par des statistiques sur des ensembles d'états perturbés de manière aléatoire. Par exemple, dans MASSART *et al.* [71], un ensemble de prévisions est généré en perturbant les observations assimilées. Des considérations

Jan.	Fév.	Mar.	Avr.	Mai	Jui.
7.50	8.19	9.89	9.20	7.36	6.52
Jui.	Août.	Sep.	Oct.	Nov.	Déc.
6.15	6.70	9.05	8.78	8.03	8.04

Tab. II.3.1 : Moyenne globale des estimations mensuelles de Σ en %, entre les niveaux de pression 200 hPa et 0.5 hPa. Estimation réalisée sur l'année 2008. Extrait de MASSART *et al.* [71].

statistiques permettent alors d'en déduire les écarts-types d'erreur d'ébauche. La FIG. II.3.2 représente la moyenne zonale des écarts-types d'erreur d'ébauche estimés durant le mois de septembre 2008 pour l'ozone en %. Elle est extraite de l'une des études réalisées dans ce travail de thèse sur le mois de septembre 2008 en suivant la méthode de MASSART *et al.* [71]. Sa structure est différente de celle de la moyenne zonale du champ d'ozone, ce qui tend à confirmer l'idée que l'incertitude liée à l'ébauche ne varie pas conjointement avec la concentration de ce champ. La table II.3.1, extraite des travaux de MASSART *et al.* [71], illustre la variation temporelle de Σ . Ainsi, dans le cas de la chimie atmosphérique, Σ possède une variation saisonnière avec des maxima en mars, avril et septembre et des minima durant l'été (de l'hémisphère nord).

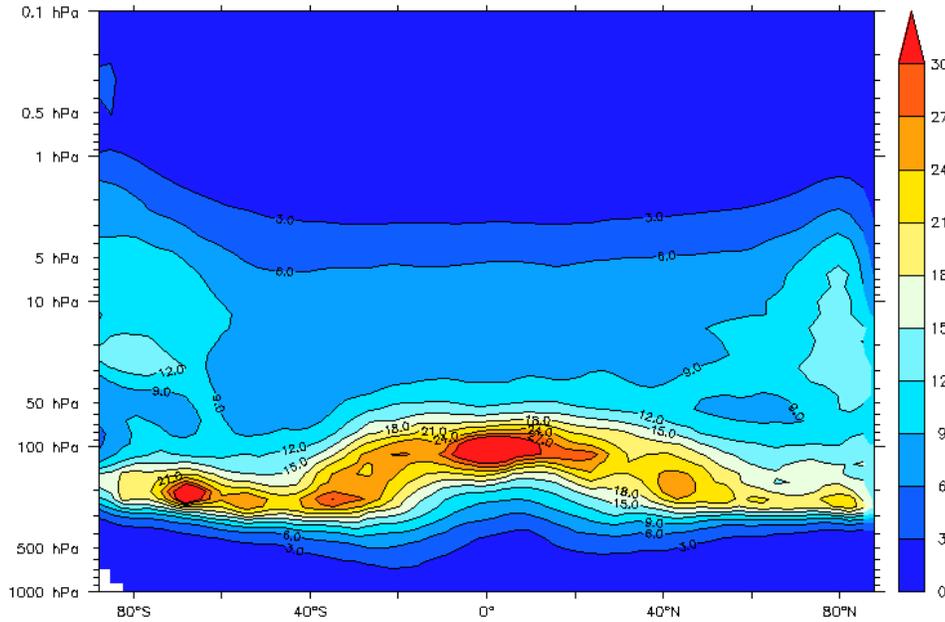


Fig. II.3.2 : Moyenne zonale des écarts-types d'erreur d'ébauche estimés pour l'ozone sur le mois de septembre 2008 en %. Détails techniques dans MASSART *et al.* [71].

L'estimation des écarts-types de l'erreur d'ébauche est un aspect important de l'assimilation de données. Elle permet d'améliorer le processus d'assimilation de données d'une part. Et d'autre part, elle donne une information précieuse sur le comportement du modèle.

3.2.4 L'opérateur de corrélation \mathbf{C}

Soit la matrice de corrélation \mathbf{C} définie précédemment dans 3.2.2 et la fonction de corrélation associée $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{C}\mathbf{x}$. Notre vecteur de contrôle étant univarié, l'effet d'une fonction de corrélation

est de lisser spatialement l'information d'un point de grille à l'autre. Ceci peut être interprété comme un **phénomène de diffusion**. D'après la formulation de WEAVER ET COURTIER [103], la matrice de corrélation \mathbf{C} peut être définie par :

$$\mathbf{C} = \mathbf{\Lambda} \tilde{\mathbf{C}} \mathbf{\Lambda}^T = \mathbf{\Lambda} \mathbf{L} \mathbf{W}^{-1} \mathbf{\Lambda}^T, \quad (\text{II.3.3})$$

où $\mathbf{\Lambda}$ est le tenseur diagonal de l'inverse des écarts-types de $\tilde{\mathbf{C}}$ (dont le but est de normaliser la diagonale de la matrice de corrélation), \mathbf{W} est le tenseur métrique (dû à la métrique particulière de l'espace étudié) et \mathbf{L} est un opérateur de diffusion.

Pour modéliser l'opérateur de diffusion \mathbf{L} , on utilise l'équation de diffusion qui s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \text{div}(\kappa \nabla \eta), \quad (\text{II.3.4})$$

où κ est le tenseur de diffusion, ici constant, et $\eta(x, t)$ est un champ à la position x et au pseudo-temps⁶ t . La condition initiale est donnée par $\eta(x, 0)$ (à $t = 0$).

Comme exposé dans WEAVER ET COURTIER [103], pour des justifications physiques liées aux échelles de corrélation, il est souhaitable de séparer le modèle de corrélation verticale du modèle de corrélation horizontale. Cette approche est efficace en termes de coût de calcul. Ainsi l'Eq. de diffusion II.3.4 est résolue sur la sphère (2D) dans un premier temps puis sur la dimension verticale (1D). Avec le système Valentina, ces 2 équations peuvent être résolues par différences finies ou par passage dans l'espace spectral. Nous reviendrons dans la partie suivante (partie III, à propos de la mise en place du système d'analyse haute résolution) sur ce second mode de résolution que nous détaillerons.

Nous introduisons tout de même une expression du résultat de l'intégration de l'Eq. II.3.4 sur un intervalle de temps $0 \leq t \leq \tau$ dans le cas du modèle de corrélation verticale (qui est donc 1D) à partir de la condition initiale $\eta(z, 0)$ (axe des z vertical). Cette solution, donnée par la fonction intégrale de convolution entre la condition initiale et une fonction gaussienne, s'écrit :

$$\eta(z, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\kappa\tau}} \int_{z'} \exp -\frac{(z - z')^2}{4\kappa\tau} \eta(z', 0) dz'. \quad (\text{II.3.5})$$

La fonction gaussienne $\exp -\frac{(z-z')^2}{4\kappa\tau} / \sqrt{4\pi\kappa\tau}$ de l'Eq. II.3.5 est homogène et isotrope puisqu'elle ne dépend que de la distance euclidienne $r = |z - z'|$. Une telle fonction définit une fonction de covariance définie positive sur \mathbb{R} (GASPARI ET COHN [37]).

L'échelle de corrélation de cette fonction gaussienne est $L = \sqrt{2\kappa\tau}$, c'est aussi l'écart-type de cette gaussienne et encore la **longueur de portée** qui caractérise notre opérateur de corrélation. La notion de longueur de portée a été initialement introduite par DALEY [21]. Si elle est grande, l'erreur se propage fortement en espace et la fonction de corrélation associée sera très étalée. Inversement, si L est petite, la fonction de corrélation associée sera peu étalée et l'erreur se propage peu.

De la même façon que l'on a procédé avec les écarts-types d'erreur d'ébauche, il est possible de diagnostiquer des longueurs de portée dans chacune des directions. Cependant, la possibilité de prendre en compte de l'**anisotropie** et de l'**hétérogénéité** des longueurs de portée horizontales dépend du mode de résolution adopté de l'Eq. II.3.4 dans le cas du modèle de corrélation horizontale (PANNEKOUCKE ET MASSART [77]). Dans Valentina, la longueur de portée peut être imposée comme une constante ou lue dans un fichier comme une constante par niveaux de pression. Elle peut également être lue dans un fichier 2D ou 3D et varier en fonction de la latitude et du niveau de pression ou de chaque dimension.

⁶La dimension temporelle est liée au phénomène diffusif et non à l'intégration du modèle.

3.3 Les coefficients correctifs multiplicatifs pour les matrices de covariance d'erreur

Nous venons de voir que les résultats du processus d'analyse dépendent fortement des covariances d'erreur d'ébauche et d'observation. Leur détermination est donc essentielle pour avoir une analyse de bonne qualité. Faisons l'hypothèse que la forme de ces covariances est correcte mais que leur amplitude est inexacte. Cette hypothèse est assez forte mais peut se justifier. En effet, les covariances d'erreur d'observation sont généralement fournies avec les données. Nous pouvons donc légitimement postuler que leur structure est correcte. Quand aux covariances d'erreur d'ébauche, nous venons d'introduire le fait qu'il est possible d'avoir une bonne approximation de leur structure par des méthodes d'ensemble (*c.f.* MASSART *et al.* [71]).

Ainsi le système Valentina permet de corriger de façon optimale les matrices de covariance d'erreur d'ébauche et d'observation par un coefficient multiplicatif. Nous introduisons ici les éléments de théorie sur lesquels s'appuie cette technique. Ceux-ci sont principalement issus de DESROZIERIS *et al.* [23] qui établit des liens statistiques entre les covariances d'erreur d'un côté et les incréments et les innovations de l'autre. Ensuite nous explicitons l'application de cette méthodologie dans le cas du 3D-FGAT et son utilisation pratique dans Valentina. Cette section est basée sur la note de travail de MASSART [68].

3.3.1 La théorie

Dans le cadre du BLUE⁷, on considère que la correction apportée à l'ébauche \mathbf{x}^b est proportionnelle à l'innovation \mathbf{d} (TALAGRAND [88]), soit la relation :

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{Kd}, \quad (\text{II.3.6})$$

où \mathbf{K} est la matrice de gain de Kalman qui s'exprime en fonction des matrices de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} et d'observation \mathbf{R} . D'autre part, sous l'hypothèse de non-corrélation entre les erreurs d'ébauche et d'observation et de linéarité de l'opérateur d'observation \mathcal{H} , coïncidant donc avec \mathbf{H} , on calcule la covariance des innovations \mathbf{d} en utilisant les définitions des EQS. II.1.14, II.1.15, II.1.18 et II.1.19 :

$$E[\mathbf{d}\mathbf{d}^T] = \mathbf{R} + \mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T. \quad (\text{II.3.7})$$

Cette expression est souvent utilisée à des fins de diagnostics afin de corriger de façon optimale les matrices de covariance d'erreur par un coefficient multiplicatif. Notamment, l'idée proposée par DESROZIERIS *et al.* [23] est de multiplier matriciellement cette expression par la matrice $\mathbf{H}\mathbf{K}$ d'une part, et par la matrice $(\mathbf{I} - \mathbf{H}\mathbf{K})$ (où \mathbf{I} est la matrice identité) d'autre part. Des développements mathématiques aboutissent aux relations :

$$\begin{aligned} E[\mathbf{H}\mathbf{K}\mathbf{d}\mathbf{d}^T] &= \mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T, \\ E[(\mathbf{I} - \mathbf{H}\mathbf{K})\mathbf{d}\mathbf{d}^T] &= \mathbf{R}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.8})$$

Les deux expressions des EQS. II.3.8 permettent d'avoir une estimation des covariances d'erreur d'ébauche \mathbf{B} dans l'espace des observations et des covariances d'erreur d'observations \mathbf{R} .

On introduit les scalaires s_b et s_o dont les carrés (par souci d'homogénéité) représentent des facteurs correctifs multiplicatifs globaux applicables aux matrices \mathbf{B} et \mathbf{R} , respectivement en

⁷Best Linear Unbiased Estimation

fonction des matrices d'origine \mathbf{B}_0 et \mathbf{R}_0 :

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= s_b^2 \mathbf{B}_0, \\ \mathbf{R} &= s_o^2 \mathbf{R}_0.\end{aligned}\tag{II.3.9}$$

Les matrices \mathbf{B}_0 et \mathbf{R}_0 sont celles que l'on a utilisées lors d'une première assimilation et que l'on souhaite donc corriger. La matrice \mathbf{B}_0 peut par exemple être celle que l'on a introduite dans la section précédente 3.2 et la matrice \mathbf{R}_0 peut initialement être la matrice de covariance d'erreur d'observation construite à partir des informations sur les données. Afin de déterminer les coefficients s_b^2 et s_o^2 , on calcule la trace de \mathbf{B} et de \mathbf{R} :

$$\begin{aligned}\text{Trace}(\mathbf{B}) &= s_b^2 \text{Trace}(\mathbf{B}_0), \\ \text{Trace}(\mathbf{R}) &= s_o^2 \text{Trace}(\mathbf{R}_0).\end{aligned}\tag{II.3.10}$$

Nous faisons l'hypothèse sous-jacente que les corrélations d'erreur d'ébauche sont correctes et donc que nous corrigeons les variances. Et en développant les EQS. II.3.10 et les EQS. II.3.8, nous obtenons les expressions utiles :

$$s_b^2 = \frac{E[\mathbf{d}^T \mathbf{H} \delta \mathbf{x}]}{\text{Trace}(\mathbf{H} \mathbf{B}_0 \mathbf{H}^T)},\tag{II.3.11}$$

$$s_o^2 = \frac{E[\mathbf{d}^T (\mathbf{y}^o - \mathbf{H} \mathbf{x}^a)]}{\text{Trace}(\mathbf{R}_0)}.\tag{II.3.12}$$

Les expressions de EQS. II.3.11 et II.3.12 permettent donc d'estimer les coefficients de proportionnalité des erreurs optimaux. Cependant, on remarque d'une part qu'il est nécessaire de disposer d'une analyse \mathbf{x}^a pour conduire ce calcul. D'autre part, s_b^2 correspond alors à la correction que l'on apporte à la matrice \mathbf{B}_0 dans l'espace des observations. Pour affiner la valeur des coefficients correctifs s_b^2 et s_o^2 , on peut procéder à une nouvelle analyse avec les nouvelles matrices de covariance d'erreur obtenues \mathbf{B} et \mathbf{R} . Ces nouvelles matrices de covariance prennent alors la place des matrices d'origine \mathbf{B}_0 et \mathbf{R}_0 des EQS. II.3.9 pour le calcul des nouveaux coefficients correctifs. On peut itérer ce processus jusqu'à la convergence des valeurs des coefficients correctifs.

3.3.2 L'utilisation pratique dans Valentina

Dans Valentina, l'opérateur d'observation \mathcal{H} est un opérateur d'interpolation (spatiale et temporelle) linéaire des points de grille vers les points d'observation. Ainsi nous pouvons le noter \mathbf{H} . Le coefficient correctif s_o^2 devient alors :

$$s_o^2 = \frac{E[\mathbf{d}^T (\mathbf{y}^o - \mathbf{H} \mathcal{M}[\mathbf{x}^a])]}{\text{Trace}(\mathbf{R}_0)},\tag{II.3.13}$$

où \mathbf{y}^o est le vecteur des observations, \mathbf{d} l'innovation, \mathbf{x}^a l'analyse et \mathcal{M} le modèle d'intégration.

Par contre, pour le coefficient correctif s_b^2 , il n'est pas possible de le déterminer avec une formule similaire à celle de l'EQ. II.3.11. En effet, dans Valentina, nous avons vu que la matrice \mathbf{B} est en partie modélisée par un opérateur de diffusion et n'est donc jamais exprimée sous forme matricielle. Il n'est donc pas aisé de calculer l'expression $\text{Trace}(\mathbf{H} \mathbf{B}_0 \mathbf{H}^T)$. Cependant, TALAGRAND [91] montre que le minimum de la fonction coût à l'optimum $\mathbf{J}(\mathbf{x}^a)$ est égal à la moitié du nombre d'observations p , soit :

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}^a) = \frac{p}{2}.\tag{II.3.14}$$

Le coefficient s_b^2 est alors recherché de telle sorte que l'EQ. II.3.14 soit satisfaite.

Nous faisons l'hypothèse que les deux corrections s_b^2 et s_o^2 sont constantes pour un cycle d'assimilation d'une journée divisée en plusieurs fenêtres. Ainsi nous remplaçons la moyenne statistique $E[.]$ par une moyenne temporelle sur l'ensemble des M fenêtres d'assimilation de la journée. L'algorithme de calcul pour une journée est le suivant :

1. initialisation,
 - (a) s_b^2 et s_o^2 avec les valeurs de la journée précédente,
 - (b) \mathbf{B} et \mathbf{R} avec respectivement $s_b^2\mathbf{B}$ et $s_o^2\mathbf{R}$;
2. boucle d'indice m sur les M fenêtres d'assimilation,
 - (a) calcul des innovations $\mathbf{d}_m = \mathbf{y}_m^o - \mathbf{H}\mathcal{M}[\mathbf{x}_m^b]$,
 - (b) calcul de l'analyse \mathbf{x}_m^a ,
 - (c) calcul de $\mathbf{y}_m^o - \mathbf{H}\mathcal{M}[\mathbf{x}_m^a]$;
3. calcul du coefficient correcteur s_o^2 pour la journée tel que $s_o^2 = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{\mathbf{d}_m^T(\mathbf{y}_m^o - \mathbf{H}\mathcal{M}[\mathbf{x}_m^a])}{\text{Trace}(\mathbf{R}_m)}$;
4. calcul du coefficient correcteur s_b^2 pour la journée tel que $\frac{2}{M} \sum_{m=1}^M \frac{\mathbf{J}(\mathbf{x}_m^a, s_o^2, s_b^2)}{p_m} = 1$;
5. mise à jour des coefficients correcteurs s_b^2 et s_o^2 .

Troisième partie

Mise en place du système d'analyse haute résolution

Ceux-là seuls qui se prosternent comme des esclaves devant la réussite peuvent trouver que l'efficacité est admirable indépendamment de l'accomplissement auquel elle tend.

Extrait de *Pourquoi je ne suis pas chrétien*,
Bertrand Russell, mathématicien et philosophe anglais.

Cette troisième partie de la thèse décrit notre motivation pour écrire un article publié dans le journal *Monthly Weather Review* ainsi que ma participation dans ce travail.

Notre objectif est de perfectionner les possibilités que l'assimilation de données peut apporter à la chimie atmosphérique. Et plus particulièrement l'exploitation optimale de l'information provenant des instruments embarqués à bord des satellites de dernière génération à vocation **opérationnelle** ou de recherche. Ceux-ci sont notamment caractérisés par le nombre toujours grandissant d'observations qu'ils fournissent. Mais aussi par la taille des pixels de ces données (inférieure à 50 km) qui est bien inférieure à celle de la résolution horizontale couramment utilisée dans les MCT en version globale dans le cadre de l'assimilation de données. Par exemple, le système d'assimilation Bascoe du BIRA est utilisé avec une grille horizontale de 3.75° par 5° (ERRERA *et al.* [27]) ou 2.5° par 3.75° (LAHOZ *et al.* [55]). Le modèle TM5 du KNMI est utilisé avec une grille horizontale de 4° par 6° ou 2° par 3° (HUIJNEN *et al.* [45]). Notamment, 30 années de réanalyses de la composition atmosphérique de l'ozone ont été faites au KNMI sur une grille de 2° par 3° (VAN DER A *et al.* [98]). Enfin citons également le modèle GMI de la NASA qui a été utilisé pour la modélisation stratosphérique avec une grille de 4° par 5° (ROTMAN *et al.* [82]) et pour la modélisation combinée de la stratosphère et de la troposphère avec une grille de 2° par 2.5° (ALLEN *et al.* [2]). Quant à Mocage, pour la plupart de ses applications récentes, les grilles horizontales globales utilisées sont la grille Gaussienne T42 ou la grille régulière 2° par 2° (correspondant respectivement à des cellules d'environ 310×310 km² ou 220×220 km² à l'équateur).

Une méthode couramment utilisée pour assimiler de telles données consiste à moyenner de manière appropriée l'ensemble des données mesurées à l'intérieur d'une cellule du modèle durant une fenêtre temporelle donnée. Ce processus, connu sous le nom de création de **super-observations**, a été introduit par LORENC [63] en 1981. La moyenne résultant de la création des super-observations génère une perte d'information. Elle peut par exemple lisser les gradients des champs physiques représentés par les observations ou empêcher la représentation de phénomènes locaux. Augmenter la résolution du modèle jusqu'à celle des observations n'est pas actuellement envisageable à cause des limites de calcul en termes de mémoire et de temps. Mais une augmentation raisonnable de la résolution du modèle permet néanmoins de générer des jeux de super-observations plus fins et ainsi une meilleure prise en compte de l'information de petite échelle disponible dans les données.

En conséquence, nous avons entrepris de développer une assimilation avec une grille horizontale de plus haute résolution que la grille régulière 2° par 2° de Mocage, tout en conservant un coût d'exécution raisonnable. Le panel des options pour atteindre ce but est vaste. En premier lieu, j'ai implémenté la résolution du problème d'assimilation de données dans l'**espace spectral**. Cela permet entre autres de travailler avec un vecteur de contrôle de dimension inférieure. Aussi, pour modéliser la matrice de covariance d'erreur d'ébauche **B**, j'ai choisi de résoudre l'équation de diffusion dans l'espace spectral. La méthodologie est développée dans le premier chapitre de cette partie.

Ensuite, nous avons opté pour une **stratégie multi-échelles** utilisant la méthode variationnelle 3D-FGAT. Cette stratégie est basée sur l'**algorithme de la boucle externe**. Cet algorithme, détaillé dans le deuxième chapitre de cette partie, permet notamment d'utiliser un

modèle de propagation linéaire simplifié avec une résolution horizontale différente à chaque itération de la boucle externe. Ce processus peut considérablement réduire le coût de l'assimilation.

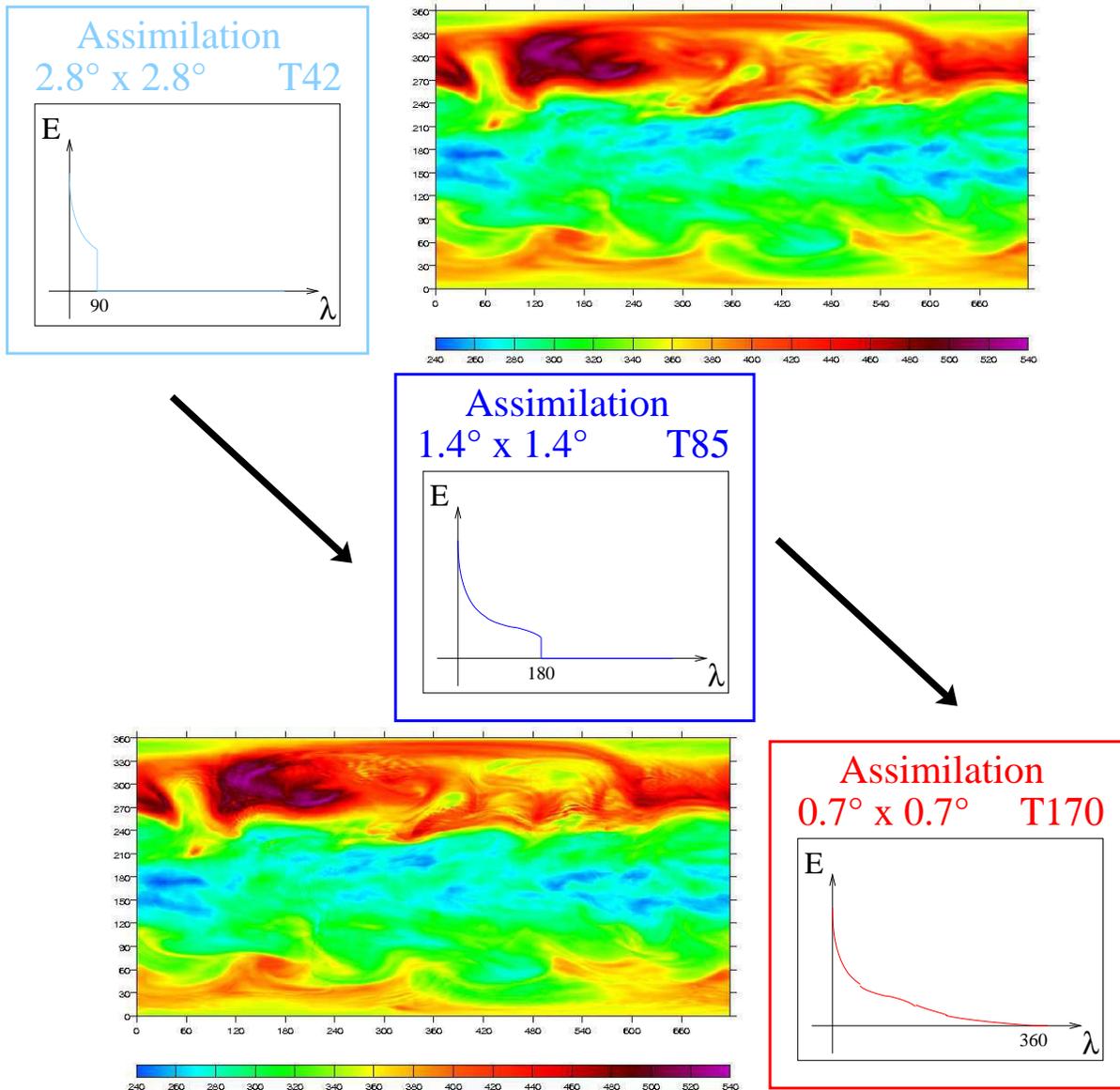


Fig. III.0.3 : Représentation des coefficients spectraux pris en compte en fonction de l'échelle de la grille d'assimilation, avec l'énergie en ordonnée et le nombre de longueur d'onde en abscisse. Deux champs de colonnes totales d'ozone, en fonction du nombre de coefficients spectraux pris en compte (T42 et T170), y sont accolées.

La FIG. III.0.3 illustre le fonctionnement de la stratégie multi-échelles. Tout d'abord, le processus d'assimilation prend place sur une grille grossière T42, générant ainsi les structures les plus larges du champ étudié. De ce fait, on espère que lors des étapes suivantes, le nombre d'itérations du processus de minimisation de l'assimilation soit diminué. De plus, l'interpolation du champ physique d'une grille à l'autre est facilitée par le contrôle spectral que nous avons mis en place. Les étapes suivantes utilisent successivement une grille intermédiaire T85 et une grille fine T170 et les champs sont à même de posséder des spectres énergétiques plus vastes. Ainsi des

structures bien plus fines peuvent être représentées. Cela est illustré par les champs de colonnes totales d’ozone de la FIG. III.0.3 sur grilles T42 et T170.

Au final, la stratégie multi-échelles devait donc permettre d’obtenir un champ d’ozone optimisé sur la grille haute résolution tout en conservant des limites raisonnables au temps de calcul. Au préalable, j’ai étudié le comportement de l’assimilation de données en combinant la boucle externe et le 3D-FGAT, et notamment la possibilité de pallier l’hypothèse simplificatrice du 3D-FGAT sur l’identité du modèle linéaire tangent utilisé lors de la minimisation. Nous verrons dans un troisième chapitre que cette combinaison pose problème dans le cas de situations atmosphériques dominées par le transport. Les analyses peuvent alors être dégradées, ce qui est bien entendu à l’opposé du résultat escompté. C’est ce constat qui nous a incité à écrire une publication à propos du comportement du système d’assimilation de données dans une telle configuration. En conséquence, cette publication est résumée et présentée dans le troisième chapitre de cette partie. Nous concluons cette partie en explicitant plus en détail notre choix de nous tourner vers la méthode variationnelle 4D-Var en terme d’incrément.

1

L'assimilation en harmoniques sphériques

Un champ physique quelconque sur la sphère peut se décomposer en une somme infinie d'harmoniques sphériques. Il est alors représenté par une suite de coefficients dits spectraux, que l'on tronque en fonction de l'erreur de résolution prête à être admise. Dans ce chapitre, nous allons présenter les développements que j'ai implémenté dans le système Valentina afin de contrôler la solution dans l'espace des harmoniques sphériques (ou espace spectral).

Le contrôle était jusqu'alors réalisé sur grille régulière ou sur grille Gaussienne. Nous verrons que le bénéfice immédiat de l'expression du vecteur de contrôle dans l'espace spectral est de diminuer la dimension du vecteur de contrôle. Un intérêt supplémentaire de la décomposition en harmoniques sphériques vient du fait que lorsque la corrélation de l'erreur d'ébauche est homogène et que sa modélisation s'exprime par une équation de diffusion, cette modélisation s'exprime facilement dans l'espace spectral. Ces deux aspects peuvent être combinés afin de minimiser les changements d'espace dans l'expression de la fonction coût.

Dans ce chapitre, nous introduisons tout d'abord la notion d'harmoniques sphériques plus en détail. Puis les relations mathématiques entre les espaces physique et spectral d'expression du champ d'ozone, nécessaires à l'assimilation spectrale, sont définies. Enfin nous détaillons les modifications inhérentes à l'écriture de la fonction coût.

1.1 Les harmoniques sphériques

Le développement en harmoniques sphériques est l'équivalent, appliqué aux fonctions angulaires, du développement en séries de Fourier pour les fonctions périodiques. Nous l'utilisons pour décomposer un champ quelconque défini sur une sphère. Les harmoniques sphériques sont les fonctions-vecteurs Y_n^m qui satisfont l'équation de Laplace en coordonnées sphériques (le système de coordonnées sphériques est illustré par la FIG. III.1.1). Ces fonctions-vecteurs s'écrivent :

$$Y_n^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (\text{III.1.1})$$

où ϕ est la longitude, θ la latitude, m est le nombre d'onde zonal et n le nombre d'onde total. Les termes P_n^m sont les polynômes de Legendre. Ils sont définis pour des valeurs entières et positives de n et des valeurs entières de m comprises entre $-n$ et $+n$. Ils s'écrivent :

$$P_n^m(\cos \theta) = \frac{(-1)^m}{2^n \cdot n!} (1 - \cos^2 \theta)^{m/2} \frac{\partial^{n+m} (\cos^2 \theta - 1)^n}{\partial (\cos \theta)^{n+m}}. \quad (\text{III.1.2})$$

Les polynômes de Legendre sont des produits de sinus et de cosinus de puissances n et m .

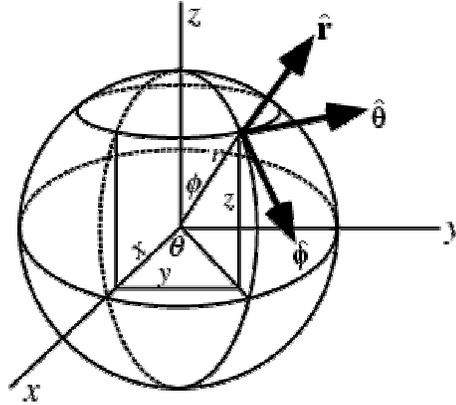


Fig. III.1.1 : Système de coordonnées sphériques.

Les fonctions Y_n^m sont des surfaces qui enveloppent la sphère et qui représentent des ondulations de part et d'autre de zéro. La fonction harmonique passe autant de fois par zéro que vaut son degré n . Parmi ces passages par zéro, m se font suivant une longitude et $n - m$ suivant une latitude. La FIG. III.1.2 montre des fonctions harmoniques sphériques de degré et d'ordre variables. Les fonctions Y_n^m sont orthonormalisées pour le produit scalaire $\langle f_1 | f_2 \rangle = \int_{S^2} f_1^* f_2 \sin \theta d\theta d\phi$, où S^2 est la sphère unité et $*$ représente le conjugué du complexe.

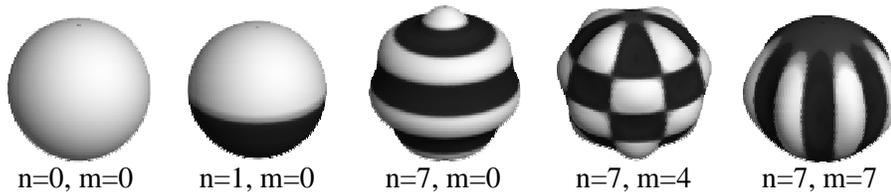


Fig. III.1.2 : Fonctions-vecteurs harmoniques sphériques Y_n^m . La valeur de l'harmonique sphérique réelle est représentée en blanc ou en noir en fonction de son signe. Extrait du site : <http://astrosurf.com/luxorion/terre-champ-magnetique2.htm>.

Dans Valentina, nous utilisons les routines *Spherepack*⁸ pour la décomposition d'un champ initialement défini sur une grille de Gauss en harmoniques sphériques (opération d'analyse **A**), pour la transformation inverse (opération de synthèse **S**) et quelques autres opérations effectuées dans l'espace des harmoniques sphériques. C'est pourquoi nous ne détaillons pas plus amplement la théorie, celle-ci étant disponible dans la documentation de *Spherepack* (ADAMS [1] et SWARTZ-TRAUBER [87] entre autres). Notons juste que, comme nous travaillons sur des champs de valeurs réelles, chaque Y_n^m peut être divisée en deux et le champ décomposé en harmoniques sphériques est ainsi défini par deux suites de coefficients **a** et **b** (appelés les **coefficients spectraux**). D'autre part, les champs sur lesquels nous travaillons sont discrétisés en fonction de l'altitude. Ainsi ils sont décomposés pour chaque niveau d'altitude de la discrétisation. En résumé, un champ Ψ sur

⁸*Spherepack* est une collection de programmes FORTRAN facilitant la modélisation informatique pour les processus géophysiques. Ce travail est en partie pris en charge par le programme CHAMMP, administré par l'Office of Energy Research sous la tutelle de l'Office of Health and Environmental Research du département de l'énergie américain.

la sphère unité se développe en :

$$\Psi(\theta, \phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \mathbf{a}_n^0 P_n^0(\cos \theta) + \sum_{m=1}^n (\mathbf{a}_n^m \cos(m\phi) + \mathbf{b}_n^m \sin(m\phi)) P_n^m(\cos \theta) \right\}. \quad (\text{III.1.3})$$

Un des intérêts de la décomposition en coefficients spectraux d'un champ réside dans le fait que l'on peut travailler sur un nombre tronqué de coefficients. On ne perd alors par cette troncature que les informations de petite échelle car les principales structures du champ étudié sont contenues dans les premiers coefficients. Cependant, il est à noter que la décomposition spectrale ne convient qu'à un champ physique discrétisé sur une grille globale figée (pas de possibilité de zoom régional ni de raffinement local). Comme nous souhaitons réaliser une assimilation de données avec boucles externes dans laquelle nous augmentons la taille de la troncature (et donc la résolution du maillage) à chaque boucle externe, cette troncature est particulièrement adaptée. En effet, le champ ne nécessite plus d'être interpolé lors du passage d'une grille à une nouvelle plus fine. Ainsi cette stratégie devait permettre d'obtenir un champ optimisé sur la grille à haute résolution tout en conservant une limite raisonnable au temps de calcul.

1.2 Les espaces physique et spectral d'expression du champ d'ozone

1.2.1 Notations

Pour commencer, nous allons définir les notations relatives aux différents espaces utilisés. Soit \mathbf{x} un vecteur à trois dimensions représentant un champ physique discrétisé et, plus particulièrement dans cette thèse, la concentration d'une espèce chimique dans l'atmosphère. Par souci de simplicité, dans la suite de ce document nous allons développer les relations pour un champ défini sur la sphère, et donc à deux dimensions, puisque ces relations ne dépendent pas de l'altitude.

Soit n_ϕ le nombre de points de latitude et n_θ le nombre de points de longitude. n_ϕ correspond également au nombre d'onde total des coefficients spectraux. On définit également le nombre d'onde zonal total n_{ab} :

$$n_{ab} = \begin{cases} \min((n_\theta + 2)/2, n_\phi) & \text{si } n_\theta \text{ pair} \\ \min((n_\theta + 1)/2, n_\phi) & \text{si } n_\theta \text{ impair} \end{cases}. \quad (\text{III.1.4})$$

La concentration sur une grille Gaussienne est notée $\mathbf{x}_g = \{\mathbf{x}\}_{i,j}$, où i représente la latitude et j la longitude tels que $(i, j) \in [1, n_\phi] \times [1, n_\theta]$. La concentration exprimée en harmoniques sphériques est quant à elle notée $\mathbf{x}_s = \{\{\mathbf{a}_x\}_{i,j}, \{\mathbf{b}_x\}_{i,j}\}$, où \mathbf{a}_x et \mathbf{b}_x sont les coefficients spectraux définis dans la section 1.1, avec $1 \leq i \leq n_{ab}$ et $1 \leq j \leq n_\phi$.

Nous introduisons maintenant trois produits scalaires utiles. Tout d'abord le produit scalaire cartésien défini par :

$$\langle \mathbf{x}_g, \mathbf{y}_g \rangle_c = \sum_{i,j} \mathbf{x}_{i,j} \mathbf{y}_{i,j}, \forall (i, j) \in [1, n_\phi] \times [1, n_\theta]. \quad (\text{III.1.5})$$

Puis le produit scalaire sur grille de Gauss :

$$\langle \mathbf{x}_g, \mathbf{y}_g \rangle_g = \frac{2\pi}{n_\theta} \sum_{i,j} \mathbf{W}_i^{pg} \mathbf{x}_{i,j} \mathbf{y}_{i,j}, \forall (i, j) \in [1, n_\phi] \times [1, n_\theta]. \quad (\text{III.1.6})$$

où \mathbf{W}^{pg} est la matrice diagonale des poids de Gauss fournie par *Spherepack* et dépendante de la latitude.

Et enfin le produit scalaire en harmoniques sphériques :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_s, \mathbf{y}_s \rangle_s &= \frac{\pi}{2} \sum_j \mathbf{a}_x(1, j) \mathbf{a}_y(1, j) && , \forall (i, j) \in [1, n_{ab}] \times [1, n_\phi]. \\ &+ \pi \sum_{i \neq 1, j} (\mathbf{a}_x(i, j) \mathbf{a}_y(i, j) + \mathbf{b}_x(i, j) \mathbf{b}_y(i, j)) \end{aligned} \quad (\text{III.1.7})$$

Nous définissons également les matrices \mathbf{W}_g et \mathbf{W}_s :

$$\mathbf{W}_g = \frac{2\pi}{n_{lon}} \begin{bmatrix} \mathbf{W}_1^{pg} & 0 & \dots & & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \mathbf{W}_{nlat}^{pg} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \mathbf{W}_1^{pg} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & & & \dots & 0 & \mathbf{W}_{nlat}^{pg} \end{bmatrix}, \quad (\text{III.1.8})$$

$$\mathbf{W}_s = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_s^a & 0 \\ 0 & \mathbf{W}_s^b \end{bmatrix}, \quad (\text{III.1.9})$$

avec

$$\mathbf{W}_s^a = \begin{bmatrix} \frac{\pi}{2} & 0 & \dots & & \dots & 0 \\ 0 & \pi & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \pi & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \frac{\pi}{2} \\ & & & & \pi & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & & & \dots & 0 & \pi \end{bmatrix}, \quad (\text{III.1.10})$$

et

$$\mathbf{W}_s^b = \begin{bmatrix} \pi & 0 & \dots & & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & & \dots & 0 & \pi \end{bmatrix}. \quad (\text{III.1.11})$$

De sorte que nous pouvons écrire les **produits scalaires dits gaussien et spectral** sous forme matricielle :

$$\langle \mathbf{x}_g, \mathbf{y}_g \rangle_g = \mathbf{x}_g^T \mathbf{W}_g \mathbf{y}_g, \quad (\text{III.1.12})$$

$$\langle \mathbf{x}_s, \mathbf{y}_s \rangle_s = \mathbf{x}_s^T \mathbf{W}_s \mathbf{y}_s. \quad (\text{III.1.13})$$

1.2.2 Équivalence des produits scalaires

Soient \mathbf{A} et \mathbf{S} les opérateurs d'analyse et de synthèse qui transforment, respectivement, un champ donné sur grille de Gauss en harmoniques sphériques et vice-versa. Ainsi on a les relations suivantes :

$$\langle \mathbf{x}_g, \mathbf{y}_g \rangle_g = \langle \mathbf{A}\mathbf{x}_g, \mathbf{A}\mathbf{y}_g \rangle_s, \quad (\text{III.1.14})$$

$$\langle \mathbf{S}\mathbf{x}_s, \mathbf{S}\mathbf{y}_s \rangle_g = \langle \mathbf{x}_s, \mathbf{y}_s \rangle_s. \quad (\text{III.1.15})$$

En développant l'EQ. III.1.15 avec les expressions matricielles des produits scalaires des EQS. III.1.12 et III.1.13, il vient :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}\mathbf{x}_s, \mathbf{S}\mathbf{y}_s \rangle_g &= \langle \mathbf{x}_s, \mathbf{y}_s \rangle_s \\ \Leftrightarrow (\mathbf{S}\mathbf{x}_s)^T \mathbf{W}_g (\mathbf{S}\mathbf{y}_s) &= \mathbf{x}_s^T \mathbf{W}_s \mathbf{y}_s \\ \Leftrightarrow \mathbf{x}_s^T \mathbf{S}^T \mathbf{W}_g \mathbf{S} \mathbf{y}_s &= \mathbf{x}_s^T \mathbf{W}_s \mathbf{y}_s. \end{aligned} \quad (\text{III.1.16})$$

Ce qui nous permet de déduire par identification que :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^T \mathbf{W}_g \mathbf{S} &= \mathbf{W}_s \\ \Rightarrow \mathbf{S}^T &= \mathbf{W}_s \mathbf{A} \mathbf{W}_g^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{III.1.17})$$

en faisant l'hypothèse que $\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{A}$. Nous disposons dorénavant de l'adjoint de \mathbf{S} pour le produit scalaire cartésien que j'ai codé dans le système Valentina. Et j'ai pu vérifier numériquement que l'on a bien l'égalité :

$$\langle \mathbf{x}_g, \mathbf{S}\mathbf{y}_s \rangle_c = \langle \mathbf{W}_s \mathbf{A} \mathbf{W}_g^{-1} \mathbf{x}_g, \mathbf{y}_s \rangle_c \quad (\text{III.1.18})$$

1.3 Décomposition et réécriture de la fonction coût

1.3.1 Décomposition de l'opérateur B

Nous considérons un champ \mathbf{x}_g défini sur grille Gaussienne. On peut réécrire la fonction coût pour le 3D-FGAT de l'EQ. II.1.36 avec le produit scalaire cartésien comme suit :

$$\mathbf{J}(\delta \mathbf{x}_g) = \frac{1}{2} \langle \delta \mathbf{x}_g, \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x}_g \rangle_c + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \left\langle (\mathbf{d}_i - \mathbf{H}_i(\delta \mathbf{x}_g)), \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{d}_i - \mathbf{H}_i(\delta \mathbf{x}_g)) \right\rangle_c. \quad (\text{III.1.19})$$

Attardons-nous sur la formulation de $\mathbf{J}_b = \frac{1}{2} \langle \delta \mathbf{x}_g, \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x}_g \rangle_c$. On rappelle que, d'après les EQS. II.3.2 et II.3.3, on peut écrire la décomposition de l'opérateur \mathbf{B} suivante :

$$\mathbf{B} = \mathbf{\Sigma} \mathbf{C} \mathbf{\Sigma} = \mathbf{\Sigma} \mathbf{\Lambda} \mathbf{L} \mathbf{W}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Sigma}, \quad (\text{III.1.20})$$

où $\mathbf{\Sigma}$ correspond à la matrice diagonale des écarts-types d'erreur d'ébauche, \mathbf{C} à la matrice de corrélation normalisée qui est modélisée par l'opérateur de diffusion, $\mathbf{\Lambda}$ à la normalisation (dont le calcul est détaillé dans l'annexe B), \mathbf{L} à l'opérateur de diffusion et \mathbf{W} à la métrique (matrice diagonale des éléments locaux de surface $\nabla_{s_1} \nabla_{s_2}$).

L'Eq. III.1.20 est utilisée dans WEAVER ET COURTIER [103] pour un champ sur grille physique (régulière ou Gaussienne). La présence de \mathbf{W}^{-1} illustre explicitement la dépendance à la grille de l'opérateur de corrélation et ainsi au produit scalaire du terme d'ébauche \mathbf{J}_b dont la métrique dépend de \mathbf{C}^{-1} . Ici \mathbf{W} désigne \mathbf{W}_g et nous définissons l'opérateur \mathbf{B}_g :

$$\mathbf{B}_g = \mathbf{\Sigma} \mathbf{\Lambda} \mathbf{L} \mathbf{W}_g^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Sigma}. \quad (\text{III.1.21})$$

D'après WEAVER ET COURTIER [103], nous avons la relation suivante concernant la matrice de covariance :

$$\mathbf{L} \mathbf{W}^{-1} = \mathbf{L}^{\frac{1}{2}} \mathbf{W}^{-1} \mathbf{L}^{\frac{T}{2}}, \quad (\text{III.1.22})$$

où $\mathbf{L}^{\frac{1}{2}}$ est la diffusion sur la moitié de l'intervalle pseudo-temporel utilisé pour \mathbf{L} . En concaténant les Eqs. III.1.21 et III.1.22 nous obtenons la relation :

$$\mathbf{B}_g = \mathbf{\Sigma} \mathbf{\Lambda} \mathbf{L}^{\frac{1}{2}} \mathbf{W}_g^{-1} \mathbf{L}^{\frac{T}{2}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Sigma}. \quad (\text{III.1.23})$$

En injectant l'inverse de l'opérateur \mathbf{B}_g comme nous venons de le définir dans \mathbf{J}_b , nous pouvons écrire :

$$\mathbf{J}_b(\mathbf{x}_g) = \frac{1}{2} \delta \mathbf{x}_g^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{L}^{-\frac{T}{2}} \mathbf{W}_g \mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{\Sigma}^{-1} \delta \mathbf{x}_g. \quad (\text{III.1.24})$$

Dans l'annexe D, nous développons la fonction coût de l'ébauche \mathbf{J}_b afin de l'exprimer comme un produit scalaire cartésien de deux vecteurs spectraux. Ce développement s'appuie sur l'expression de l'opérateur de diffusion \mathbf{L} dans l'espace spectral :

$$\mathbf{L} = \mathbf{S} \mathbf{L}_s \mathbf{A}, \quad (\text{III.1.25})$$

où \mathbf{L}_s est une matrice diagonale correspondant à la diffusion dans l'espace spectral (dont l'expression est fournie dans l'annexe C). Il en résulte que la fonction coût de l'ébauche peut s'écrire :

$$\mathbf{J}_b(\mathbf{x}_g) = \frac{1}{2} [\mathbf{W}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{L}_s^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{\Sigma}^{-1} \delta \mathbf{x}_g]^T [\mathbf{W}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{L}_s^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{\Sigma}^{-1} \delta \mathbf{x}_g]. \quad (\text{III.1.26})$$

1.3.2 Préconditionnement

Nous utilisons le preconditionnement suivant sur la variable $\delta \mathbf{x}_g$:

$$\mathbf{v}_s = \mathbf{W}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{L}_s^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{\Sigma}^{-1} \delta \mathbf{x}_g. \quad (\text{III.1.27})$$

Notons que la variable \mathbf{v}_s est exprimée dans l'espace spectral.

De manière équivalente, en utilisant la relation $\mathbf{S} = \mathbf{A}^{-1}$, on exprime $\delta \mathbf{x}_g$ en fonction de \mathbf{v}_s :

$$\delta \mathbf{x}_g = \mathbf{\Sigma} \mathbf{\Lambda} \mathbf{S} \mathbf{L}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{W}_s^{-\frac{1}{2}} \mathbf{v}_s. \quad (\text{III.1.28})$$

On définit la matrice $\mathbf{B}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{\Sigma} \mathbf{\Lambda} \mathbf{S} \mathbf{L}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{W}_s^{-\frac{1}{2}}$ et l'Eq. III.1.28 devient alors :

$$\delta \mathbf{x}_g = \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{v}_s. \quad (\text{III.1.29})$$

En injectant l'Eq. III.1.27 dans l'Eq. III.1.26, on obtient la relation :

$$\mathbf{J}_b(\mathbf{v}_s) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{v}_s, \mathbf{v}_s \rangle_c. \quad (\text{III.1.30})$$

Nous pouvons maintenant entièrement réécrire la fonction coût du 3D-FGAT en fonction de \mathbf{v}_s :

$$\mathbf{J}(\mathbf{v}_s) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{v}_s, \mathbf{v}_s \rangle_c + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \left\langle (\mathbf{d}_i - \mathbf{H}_i(\mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{v}_s)), \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{d}_i - \mathbf{H}_i(\mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{v}_s)) \right\rangle_c. \quad (\text{III.1.31})$$

1.3.3 Gradient

Nous déduisons de l'EQ. III.1.31 les gradients de \mathbf{J}_b et de \mathbf{J}_o :

$$\nabla \mathbf{J}_b(\mathbf{v}_s) = \mathbf{v}_s, \quad (\text{III.1.32})$$

et

$$\nabla \mathbf{J}_o(\mathbf{v}_s) = -\mathbf{B}^{\frac{T}{2}} \sum_{i=1}^p \mathbf{H}_i^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{d}_i - \mathbf{H}_i(\mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{v}_s)). \quad (\text{III.1.33})$$

La transposée de $\mathbf{B}^{\frac{1}{2}}$ s'écrit $\mathbf{B}^{\frac{T}{2}} = \mathbf{W}_s^{-\frac{T}{2}} \mathbf{L}_s^{\frac{T}{2}} \mathbf{S}^T \mathbf{\Lambda}^T \mathbf{\Sigma}^T$. En y injectant la relation de l'EQ. III.1.17 sur le transposé de $\mathbf{\Sigma}$, on obtient :

$$\mathbf{B}^{\frac{T}{2}} = \mathbf{W}_s^{-\frac{T}{2}} \mathbf{L}_s^{\frac{T}{2}} \mathbf{W}_s \mathbf{A} \mathbf{W}_g^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Sigma}.$$

Et comme \mathbf{W}_s et \mathbf{L}_s sont des matrices diagonales, on simplifie cette relation pour obtenir :

$$\mathbf{B}^{\frac{T}{2}} = \mathbf{L}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{W}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{W}_g^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Sigma}. \quad (\text{III.1.34})$$

2

L'algorithme de la boucle externe

Dans l'approche 4D-Var incrémentale, le processus de minimisation utilise un vecteur de contrôle qui est propagé par un modèle linéaire à la place d'un modèle de prévision complet. Cette version nécessite la linéarisation des opérateurs d'assimilation qui est effectuée dans le voisinage d'une première estimation ou *guess*. Ce *guess* est habituellement l'état d'ébauche. Mais la solution du problème d'optimisation linéarisé peut être utilisée comme un nouveau point *guess* autour duquel on linéarise les opérateurs d'assimilation (à la place de l'ébauche). Cela donne naissance à un nouveau problème linéaire à résoudre. Cette opération peut être répétée itérativement : cette procédure fait référence à l'introduction de **la boucle externe**.

L'algorithme de la boucle externe a été proposé par COURTIER *et al.* [18] et est utilisé en sciences atmosphériques depuis plus d'une dizaine d'années maintenant (VEERSÉ ET THÉPAUT [99]). Il a été développé dans le but d'utiliser un modèle de propagation linéaire simplifié à chaque itération de la boucle externe. Cette simplification du modèle peut considérablement réduire le coût de l'assimilation et la complexité du modèle est habituellement affinée avec le numéro de l'itération de la boucle externe.

Le système d'assimilation Valentina travaille déjà avec un opérateur d'observation linéaire \mathbf{H} . Et nous avons choisi initialement d'utiliser la méthode d'assimilation 3D-FGAT qui est basée sur l'hypothèse que le modèle linéaire \mathbf{M} , qui propage l'incrément jusqu'au temps de l'observation durant le processus de minimisation, est l'identité \mathbf{I} . En conséquence, la fonction coût que nous utilisons est déjà linéaire.

C'est pourquoi, avant de faire varier la résolution de \mathcal{M} d'une boucle externe à l'autre, j'ai voulu voir si l'intégration de \mathcal{M} avec des champs corrigés à chaque itération de la boucle externe est capable de pallier l'hypothèse simplificatrice à l'origine de la méthode 3D-FGAT. En effet, la méthode 3D-FGAT négligeant l'information provenant du modèle lors du processus de minimisation, l'innovation calculée dans la nouvelle boucle externe pourrait intégrer la physique dans l'incrément apporté au champ initial.

Dans une première section, nous présentons le formalisme associé à la boucle externe. Celui-ci est explicité dans le cas de l'assimilation avec le 3D-FGAT. Nous voyons ensuite dans une seconde section comment les coefficients correctifs multiplicatifs appliqués aux matrices de covariance d'erreur (introduits dans la section 3.3 de la partie II) sont calculés dans le cas avec boucle externe.

2.1 La boucle externe appliquée au 3D-FGAT

On rappelle que \mathbf{x}_0 est l'estimation de l'analyse au temps t_0 où l'incrément est ajouté, \mathbf{x}^b l'ébauche et \mathbf{y}_i^o le vecteur des observations au temps t_i . On rappelle également que la fonction coût de l'EQ. II.1.24 pour la méthode 4D-Var s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{x}_0) &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (\mathbf{y}_i^o - \mathcal{H}_i[\mathcal{M}_{0 \rightarrow i}[\mathbf{x}_0]])^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{y}_i^o - \mathcal{H}_i[\mathcal{M}_{0 \rightarrow i}[\mathbf{x}_0]]). \end{aligned} \quad (\text{III.2.1})$$

On définit $\mathbf{d}_i = \mathbf{y}_i^o - \mathcal{H}_i[\mathcal{M}_{0 \rightarrow i}[\mathbf{x}_0]]$.

On note \mathbf{x}_0^g l'état autour duquel on linéarise les opérateurs d'assimilation dans la méthode 4D-Var incrémentale, aussi appelé le *guess*. On pose :

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_0^g + \delta \mathbf{x}_0. \quad (\text{III.2.2})$$

Sous réserve que $\delta \mathbf{x}_0$ est suffisamment petit, on fait l'hypothèse que l'on a :

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{y}_i^o - \mathcal{H}_i[\mathcal{M}_{0 \rightarrow i}[\mathbf{x}_0^g]] - \mathbf{H}_i \mathbf{M}_{0 \rightarrow i} \delta \mathbf{x}_0.$$

On pose :

$$\mathbf{d}_i^g = \mathbf{y}_i^o - \mathcal{H}_i[\mathcal{M}_{0 \rightarrow i}[\mathbf{x}_0^g]]. \quad (\text{III.2.3})$$

En utilisant l'EQ. III.2.2, on a que : $\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b = \mathbf{x}_0^g + \delta \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b$.

On pose :

$$\mathbf{x}^b = \mathbf{x}_0^g + \delta \mathbf{x}^b. \quad (\text{III.2.4})$$

Et on peut donc écrire :

$$\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b = \delta \mathbf{x}_0 - \delta \mathbf{x}^b. \quad (\text{III.2.5})$$

Ainsi, en insérant les EQs. III.2.3 et III.2.5 dans l'EQ. III.2.1 et en changeant la variable de contrôle, la fonction coût s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\delta \mathbf{x}_0) &= \frac{1}{2}(\delta \mathbf{x}_0 - \delta \mathbf{x}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\delta \mathbf{x}_0 - \delta \mathbf{x}^b) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (\mathbf{d}_i^g - \mathbf{H}_i \mathbf{M}_{0 \rightarrow i} \delta \mathbf{x}_0)^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{d}_i^g - \mathbf{H}_i \mathbf{M}_{0 \rightarrow i} \delta \mathbf{x}_0). \end{aligned} \quad (\text{III.2.6})$$

L'hypothèse à la base du 3D-FGAT considère que : $\mathbf{M}_{0 \rightarrow i} = \mathbf{I}$. Et dans ce cas, la fonction coût est définie comme suit :

$$\mathbf{J}(\delta \mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}(\delta \mathbf{x}_0 - \delta \mathbf{x}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\delta \mathbf{x}_0 - \delta \mathbf{x}^b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (\mathbf{d}_i^g - \mathbf{H}_i \delta \mathbf{x}_0)^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{d}_i^g - \mathbf{H}_i \delta \mathbf{x}_0). \quad (\text{III.2.7})$$

Notons que l'utilisation de la boucle externe impose d'apporter l'incrément calculé pour le *guess* au temps initial.

La FIG. III.2.1 illustre le fonctionnement de la boucle externe. Lors de la première boucle externe, notée b_1 , on prend $\mathbf{x}_0^g(b_1) = \mathbf{x}^b$ et l'on retrouve alors l'écriture de la fonction coût du 3D-FGAT sans boucle externe. Lors du changement de boucle, J_b , le terme de rappel à l'ébauche, ne change pas puisqu'il représente l'écart au temps initial de la solution à l'ébauche pondéré par les incertitudes. J_0 , le terme relatif aux observations, est par contre différent. En effet, si l'on note b_k l'indice courant de la boucle externe, on a choisi $\mathbf{x}_0^g(b_k) = \mathbf{x}_0^g(b_{k-1})$. Ainsi \mathbf{d}_i^g et $\delta \mathbf{x}_0$ sont tous deux modifiés.

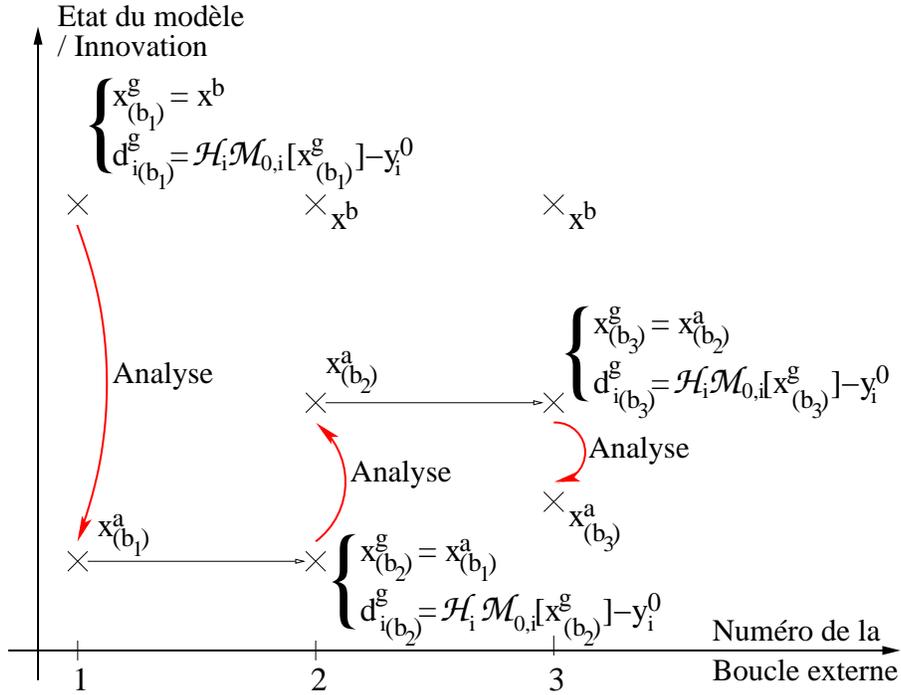


Fig. III.2.1 : Changement de boucle en boucle du guess intégré par \mathcal{M} et de l'innovation calculée.

2.2 Le calcul des coefficients correcteurs avec boucle externe

Nous avons vu dans la section 3.3 de la partie II que le système Valentina permet de corriger de façon optimale les matrices de covariance d'erreur d'ébauche et d'observation par un coefficient multiplicatif. Nous souhaitons continuer à profiter de cette méthode avec la boucle externe et j'ai donc utilisé cette combinaison au sein de Valentina. Dans le cas de la boucle externe, la solution de la fonction coût de l'EQ. III.2.7 s'écrit sous forme matricielle :

$$\mathbf{x}_0^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{K}\mathbf{d}, \quad (\text{III.2.8})$$

avec

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}^g - \mathbf{H}\delta\mathbf{x}^b. \quad (\text{III.2.9})$$

Avec la formulation de l'EQ. III.2.8, le calcul du coefficient correctif s_0^2 de l'EQ. II.3.11 reste valable sous l'hypothèse du 3D-FGAT que le linéaire du modèle est l'identité. La difficulté réside alors dans le calcul de \mathbf{d} de l'EQ. III.2.9. En remplaçant l'expression de \mathbf{d}^g et de \mathbf{x}^b dans l'EQ. III.2.9, on montre que :

$$\mathbf{d} = \mathbf{y}^o - \mathcal{H}[\mathcal{M}[\mathbf{x}_0^g]] - \mathbf{H}(\mathbf{x}^b - \mathbf{x}_0^g). \quad (\text{III.2.10})$$

En remplaçant \mathbf{x}_0^g par $\mathbf{x}_0^g(b_k) = \mathbf{x}_0^a(b_{k-1})$ dans l'expression $\delta\mathbf{x}^b$ de l'EQ. III.2.4, nous avons :

$$\begin{aligned} \delta\mathbf{x}^b(b_k) &= \mathbf{x}^b - \mathbf{x}_0^a(b_{k-1}) \\ &= \{\mathbf{x}^b - \mathbf{x}_0^g(b_{k-1})\} - \{\mathbf{x}_0^a(b_{k-1}) - \mathbf{x}_0^g(b_{k-1})\} \\ &= \delta\mathbf{x}^b(b_{k-1}) - \delta\mathbf{x}_0^a(b_{k-1}) \\ &= -\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{v}^a(b_{k-1}). \end{aligned} \quad (\text{III.2.11})$$

L'incrément sur l'ébauche, par rapport au *guess*, pour la boucle b_k est donc égal à l'opposé de l'incrément de l'analyse, par rapport à l'ébauche, de la boucle précédente b_{k-1} . Dans Valentina, nous stockons donc $\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{v}^a$ après chaque analyse et nous calculons \mathbf{d} par :

$$\mathbf{d}(b_k) = \mathbf{y}^o - \mathcal{H}[\mathcal{M}[\mathbf{x}_0^g(b_k)]] + \mathbf{HB}^{1/2}\mathbf{v}^a(b_{k-1}). \quad (\text{III.2.12})$$

L'algorithme de calcul des coefficients correcteurs pour une journée d'assimilation avec des boucles externes pour le 3D-FGAT est donc :

1. initialisation,
 - (a) s_o^2 et s_b^2 avec les valeurs de la journée précédente,
 - (b) \mathbf{R} et \mathbf{B} avec respectivement $s_o^2 \mathbf{R}$ et $s_b^2 \mathbf{B}$;
2. boucle d'indice f_m sur les f_M fenêtres d'assimilation,
 - (a) initialisation de $\mathbf{x}_{f_m}^g(b_1) = \mathbf{x}^b$,
 - (b) boucle d'indice b_k sur les b_K boucles externes,
 - i. calcul des innovations $\mathbf{d}_{f_m}^g(b_k) = \mathbf{y}_{f_m}^o - \mathcal{H}[\mathcal{M}[\mathbf{x}_{f_m}^g(b_k)]]$,
 - ii. calcul de l'analyse $\mathbf{v}_{f_m}^a(b_k)$, puis $\mathbf{x}_{f_m}^a(b_k)$,
 - iii. mise à jour du *guess* $\mathbf{x}_{f_m}^g(b_{k+1}) = \mathbf{x}_{f_m}^a(b_k)$,
 - iv. calcul de $\mathbf{HB}^{1/2}\mathbf{v}_{f_m}^a(b_k)$ si $b_k = b_{K-1}$,
 - (c) calcul de $\mathbf{y}_{f_m}^o - \mathcal{H}[\mathcal{M}[\mathbf{x}_{f_m}^a(b_K)]]$,
 - (d) calcul de $\mathbf{d}_{f_m} = \mathbf{d}_{f_m}^g(b_K) + \mathbf{HB}^{1/2}\mathbf{v}_{f_m}^a(b_{K-1})$;
3. calcul du coefficient correcteur s_o^2 pour la journée tel que

$$s_o^2 = \frac{1}{f_M} \sum_{f_m=1}^{f_M} \frac{\mathbf{d}_{f_m}^T (\mathbf{y}_{f_m}^o - \mathcal{H}[\mathcal{M}[\mathbf{x}_{f_m}^a(b_K)]])}{\text{Trace}(\mathbf{R}_{f_m})};$$
4. calcul du coefficient correcteur s_b^2 pour la journée tel que

$$\frac{2}{f_M} \sum_{f_m=1}^{f_M} \frac{J(\mathbf{x}_{f_m}^a, s_o^2, s_b^2)}{p_{f_m}} = 1;$$
5. mise à jour des coefficients correcteurs s_o^2 et s_b^2 .

3

Combinaison de la boucle externe avec le 3D-FGAT

Avant de développer une assimilation multi-échelles avec le 3D-FGAT, j'ai testé les effets de la combinaison de l'algorithme de la boucle externe avec la méthode d'assimilation variationnelle 3D-FGAT. Cette étude est présentée dans la première section de ce chapitre. Nous avons assimilé les données provenant de l'instrument MLS embarqué à bord du satellite *Aura* (*c.f.* section 4.2 de la partie I) durant le mois d'août 2007. Nous avons constaté que les résultats n'étaient pas conformes à ceux auxquels on peut s'attendre, notamment au pôle sud. En effet, les analyses obtenues y étaient dégradées et présentaient des valeurs d'écart-type aux observations assimilées plus grandes que celles des prévisions. J'ai mis ce phénomène en liaison avec la présence de vents particulièrement forts entre 90° S et 45° S.

Ce constat a motivé l'écriture d'un article évaluant les mérites de l'utilisation d'un schéma d'assimilation 3D-FGAT avec l'algorithme de la boucle externe pour des situations atmosphériques gouvernées par le transport. Cette situation y est illustrée par l'étude de cas théoriques, suivie de celle d'un cas pratique avec l'assimilation de données réelles dans Mocage. Nous mettons ainsi en évidence les faiblesses de ce type de schéma dans les régions où la vitesses du vent est comparable au rapport de la distance parcourue par les particules atmosphériques sur la durée de la fenêtre d'assimilation. Dans la deuxième section de ce chapitre, nous présentons cet article publié dans le journal *Monthly Weather Review*.

En conséquence, la stratégie visant à combiner la boucle externe et la méthode 3D-FGAT n'est pas viable dans notre application. Nous avons donc décidé de nous tourner vers la méthode 4D-Var et l'algorithme de la boucle externe est mis de côté pour le moment. Nous explicitons les motivations de ce choix dans la troisième et dernière section de ce chapitre.

3.1 Avantages et défauts de la boucle externe combinée au 3D-FGAT

3.1.1 Expérience numérique

Afin de tester la combinaison de la boucle externe et du 3D-FGAT, nous avons assimilé les données provenant d'*Aura*/MLS au sein du modèle MOCAGE. Les caractéristiques de l'instrument MLS ont été précédemment introduites à section 4.2.1 de la partie I à la page 36. Deux observations successives de MLS étant séparées par une distance de 1.5°, nous avons donc construit un jeu de super-observations sur la grille régulière 2° par 2° que nous utilisons dans

notre étude. Durant le mois d'août 2007, MLS fournit environ 1 900 profils d'ozone par jour et nous considérons jusqu'à 16 niveaux de pression allant de 0.68 hPa à 215.44 hPa pour chacun de ces profils.

L'étude se déroule pendant le mois d'août 2007. La condition initiale utilisée pour le 1^{er} août 2007 provient d'une précédente assimilation des données *Aura*/MLS au sein de MOCAGE. MOCAGE est ici utilisé avec le schéma chimique linéaire Cariolle (*c.f.* section 2.3 de la partie II).

Nous introduisons de manière succincte les paramètres que nous avons utilisé pour notre assimilation :

1. Résolution horizontale de la grille modèle : 2° par 2° ;
2. Taille de la fenêtre d'assimilation : 3 h ;
3. Nombre d'itérations de la boucle externe : 2, 3 ou 5 ;
4. Seuil de rejection des observations : 50 % pour chaque itération de la boucle externe ;
5. Nombre d'itérations du minimiseur : 25 pour les premières boucles et 100 pour la dernière ;
6. Introduction de l'incrément : au début de la fenêtre d'assimilation (condition imposée par l'algorithme de la boucle externe) ;
7. Utilisation des coefficients correctifs s_o et s_b (*c.f.* section 2.2) ;
8. Longueur de portée de la corrélation verticale : $10 \log(\text{hPa})$;
9. Longueur de portée de la corrélation horizontale : 440 km (ce qui correspond à une valeur de 4° à l'équateur) ;

On réalise les différentes expériences en faisant varier le nombre d'itérations de la boucle externe utilisées.

3.1.2 Résultats

Comparaison aux observations assimilées

Nous nous plaçons tout d'abord dans un cas avec 2 itérations de boucle externe. Comme première estimation de la cohérence de la boucle externe, on peut vérifier que les incréments générés d'une boucle à l'autre ne s'opposent pas (*i.e.* que l'on ne va pas générer des structures de valeur opposée). La FIG. III.3.1 représente la moyenne zonale et temporelle des incréments calculés lors de première itération de la boucle externe, lors de la seconde itération de la boucle externe ainsi que l'incrément total (leur somme). On constate ainsi sur les images du haut de la FIG. III.3.1 que l'incrément conserve globalement la même structure entre la première et la seconde boucle. L'incrément de la seconde boucle accentue donc la correction apportée par la première en générant une correction de plus faible amplitude. Cela justifie le fait d'utiliser un nombre d'itérations du minimiseur moins élevé pour les premières boucles, l'ordre de grandeur des structures générées diminuant de boucle en boucle.

Nous reproduisons maintenant la même expérience pour laquelle nous venons de regarder la moyenne des incréments, mais en augmentant le nombre d'itérations de la boucle externe à 3 puis à 5. Nous avons vérifié la cohérence de notre système d'assimilation par une autre estimation qui consiste à regarder les valeurs des biais et des écarts-types des analyses par rapport aux observations assimilées. Dans ce chapitre, les biais et les écarts-types représentés sont normalisés par la climatologie de FORTUIN ET KELDER [34]

Pour nos trois expériences, la moyenne mensuelle des biais et des écarts-types est représentée sur la FIG. III.3.2 dans la bande de latitude [60° N : 90° N]. Dans les 3 cas, on voit clairement que les biais et les écarts-types diminuent fortement avec l'analyse de la première boucle et

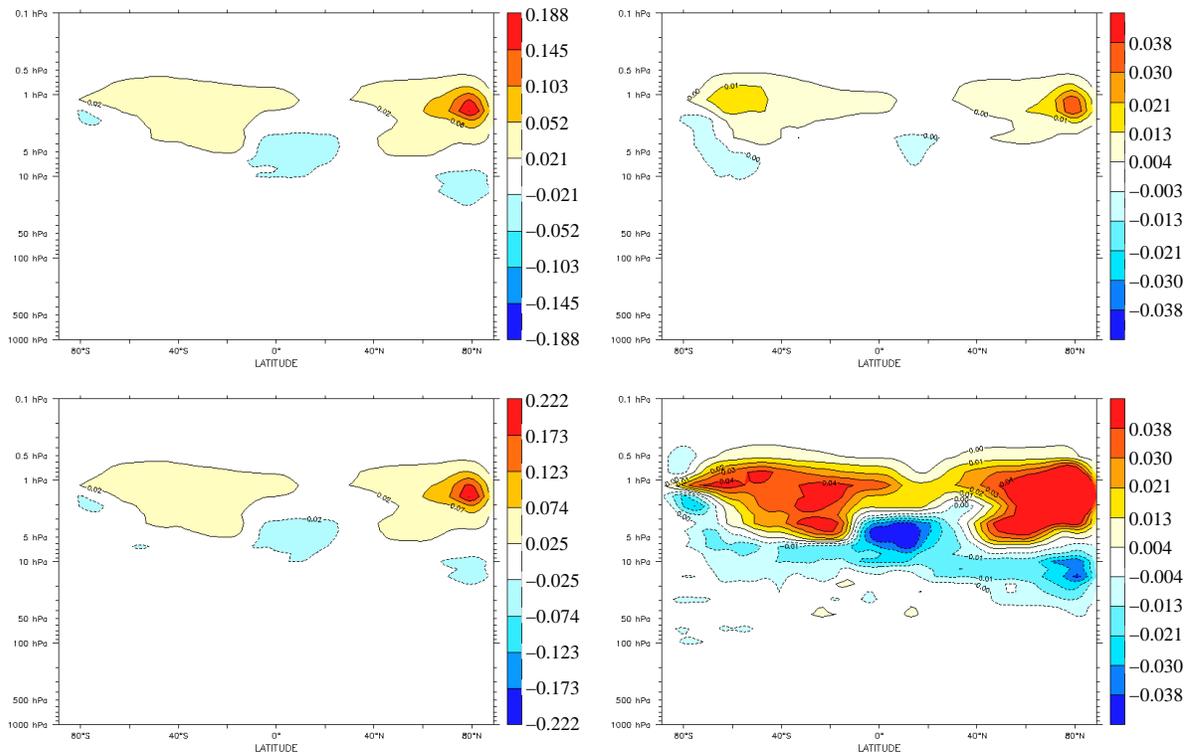


Fig. III.3.1 : Moyenne zonale et temporelle (en ppmv) sur le mois d'août 2007 de l'incrément pour 2 itérations de la boucle externe. En haut à gauche : incrément de la 1^{ère} itération; en haut à droite : incrément de la 2^{ème} itération; en bas à gauche : incrément total (la somme des deux incréments); en bas à droite : incrément de la 1^{ère} itération représenté avec la même échelle que celui de la 2^{ème} itération.

que cette diminution se poursuit plus légèrement avec l'analyse de la deuxième boucle. Dans les cas avec 3 et 5 itérations de la boucle externe, cette diminution devient insignifiante avec les analyses suivantes. Et dans le cas avec 5 itérations de la boucle externe, on peut tout de même noter que les biais obtenus dans la basse mésosphère (au-dessus de 3 hPa) sont inférieurs dès la première boucle au cas avec 2 itérations de la boucle externe (à 1 hPa, on passe de 11 à 9% environ pour la première boucle et de 9 à 6% environ pour la seconde, alors que le biais est de 10% pour l'analyse finale avec 2 itérations de la boucle externe). Cela tend à prouver qu'à certains niveaux de pression, l'analyse se rapproche de plus en plus des observations avec l'augmentation du numéro de la boucle externe.

La région présentée à l'instant est représentative des résultats obtenus dans les bandes [30° S : 30° N] et [30° N : 60° N]. Les valeurs des biais et des écarts-types d'une boucle à l'autre y sont ainsi conformes à celles que l'on s'attendait à obtenir avec l'utilisation de l'algorithme de la boucle externe. Malheureusement les résultats obtenus ne sont pas semblables autour du pôle sud et nous explorons ce résultat dans la suite.

Comportement de l'assimilation au pôle sud

Nous considérons maintenant les cas avec 2 et 3 itérations de la boucle externe dans la bande de latitude [90° S : 60° S]. Nous nous intéressons encore aux valeurs des biais et des écarts-types (normalisés) par rapport aux observations *Aura*/MLS assimilées. Celles-ci sont représentées sur la FIG. III.3.3. On voit très nettement pour le cas avec 3 itérations de la boucle externe que le

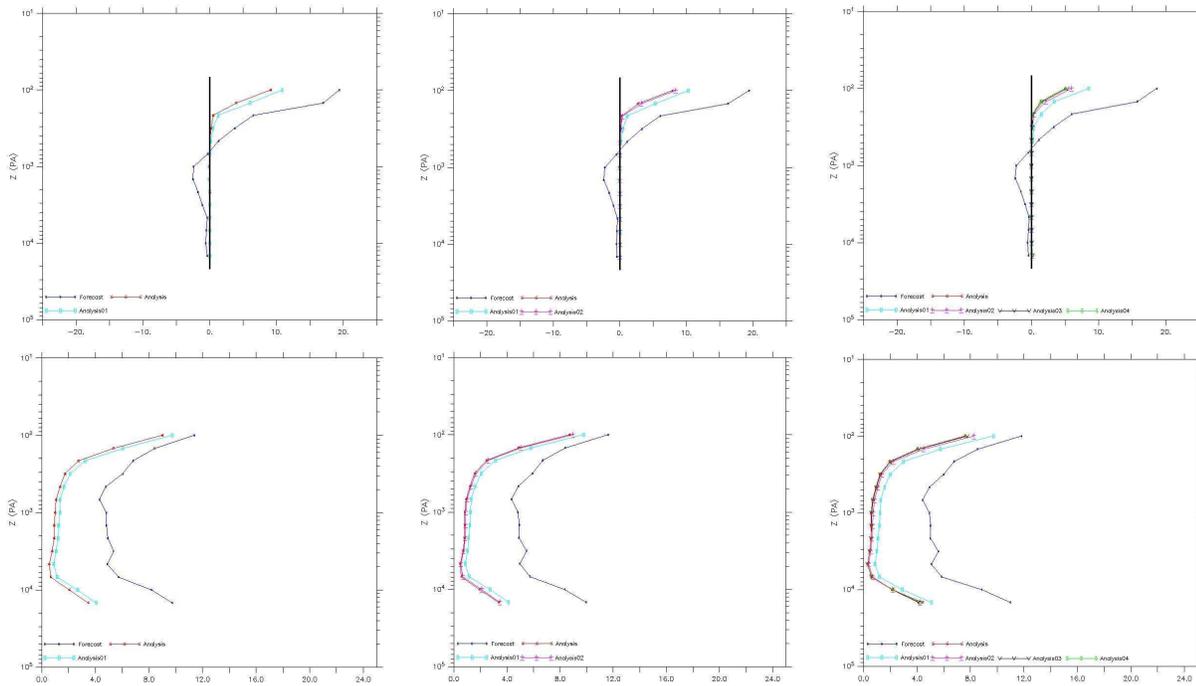


Fig. III.3.2 : *Biais (en haut, en %) et écarts-types (en bas, en %) par rapport aux observations Aura/MLS assimilées dans la bande de latitude [60°N : 90°N] pour les cas avec 2, 3 et 5 itérations de la boucle externe (de gauche à droite). En bleu foncé : biais et écarts-types de la prévision; en bleu ciel : de la première boucle; en rouge : de l'analyse; en mauve : de la deuxième boucle (cas avec 3 et 5 itérations); en noir et en vert : des troisième et quatrième boucles (cas avec 5 itérations).*

biais augmente de boucle en boucle, particulièrement autour de 10 hPa. Quant à l'écart-type, il diminue lors de la première boucle mais augmente lors des suivantes. Nous avons donc souhaité expliquer les causes de ce comportement.

Notre étude se déroule pendant le mois d'août. En Antarctique, nous sommes donc en hiver et les nuits sont continues. Le vortex polaire y isole les masses d'air de l'extérieur et ainsi les composés destructeurs de l'ozone s'y accumulent. Le retour des rayons du soleil active en particulier la chimie des chlores. Cela va contribuer à la perte chimique de l'ozone et à la formation du trou de la couche d'ozone (*c.f.* la section 3.3 de la partie I, page 29).

À cette période de l'année, l'atmosphère est caractérisée par la présence de vents extrêmement forts au pôle sud. La FIG. III.3.4 représente l'intensité des vents moyennée sur le mois d'août 2007. L'intensité (en km/h) et la direction des vents horizontaux à une altitude de 10 hPa sont représentées sur la figure de gauche. On voit que la zone dynamiquement la plus forte se situe entre 80°S et 40°S. L'intensité du vent (en km/h), en fonction de la latitude et des niveaux de contrôle, et moyennée zonalement, est représentée sur la figure de droite. En moyenne, le niveau 10 de MOCAGE correspond à peu près à une valeur de 4.2 hPa et le niveau 20 à une valeur de 35.8 hPa. On peut donc en déduire qu'au pôle sud, au niveau de la stratosphère, les vents sont bien plus forts que sur le reste du globe.

Comme nous venons de le voir sur la FIG. III.3.4, à 10 hPa, les vents sont bien plus forts au niveau du pôle sud. Ainsi, lorsque l'on choisit une fenêtre d'assimilation de 3h et que l'incrément est ajouté à l'ébauche en début de fenêtre, cet incrément peut se retrouver après propagation du modèle jusqu'à 1000 km, voir 1500 km, de l'endroit où il a été inséré. Et si l'observation est réalisée à la fin de la fenêtre d'assimilation, alors l'incrément introduit n'est plus présent à

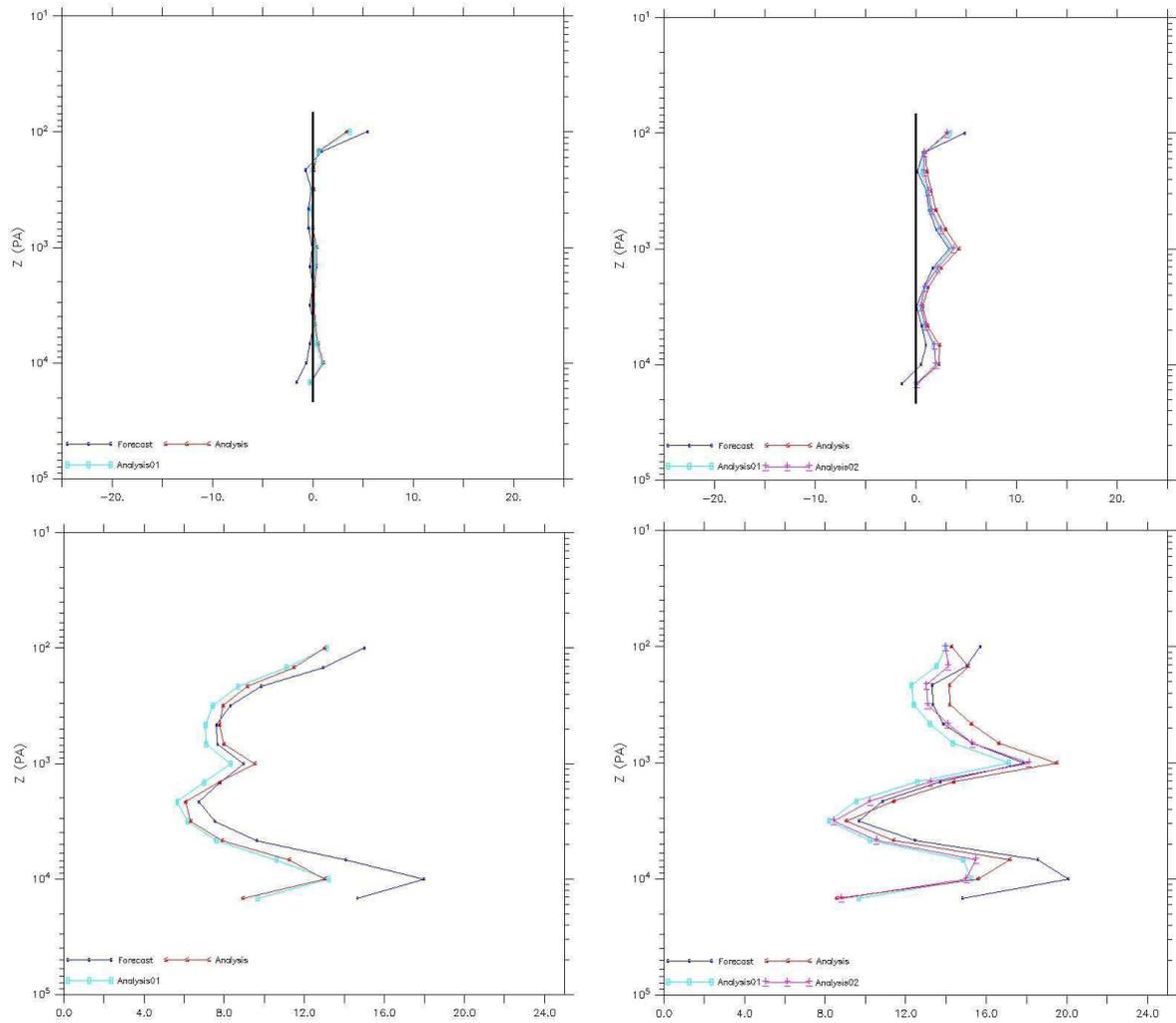


Fig. III.3.3 : *Biais (en haut, en %) et écarts-types (en bas, en %) par rapport aux observations Aura/MLS assimilées dans la bande de latitude $[90^\circ S : 60^\circ S]$ pour les cas avec 2 et 3 itérations de la boucle externe (de gauche à droite). En bleu foncé : biais et écarts-types de la prévision ; en bleu ciel : de la première boucle ; en rouge : de l'analyse ; en mauve : de la deuxième boucle (cas avec 3 itérations).*

l'emplacement de l'observation lors de la projection du champ dans l'espace des observations (lors du calcul de l'innovation). Cette situation est illustrée par la FIG. III.3.5. Ainsi, lors de l'analyse de la seconde itérations de la boucle externe, l'effet de l'analyse précédente s'est déplacé et le système va alors tendre à recréer le même incrément que celui de la première boucle et ainsi de suite. Les incréments s'additionnant, l'analyse finale sera très éloignée de l'observation.

D'autre part, la répartition des observations peut faire qu'à certains endroits, l'incrément apporté lors de l'analyse précédente aura été transporté par la propagation du modèle jusqu'aux points d'autres observations ! Dans ce cas extrême, on peut augmenter le biais et l'écart-type en ces points par rapport à l'analyse précédente. La minimisation de J_0 (le terme de la fonction coût mesurant l'écart aux observations) tend alors à corriger l'erreur apportée tandis que celle de J_b (le terme de la fonction coût mesurant l'écart à l'ébauche) se fait à un instant où cette erreur n'est pas encore présente, ce qui n'améliore pas la convergence de la minimisation.

L'hypothèse simplificatrice du 3D-FGAT qui consiste à ne pas propager l'incrément lors du

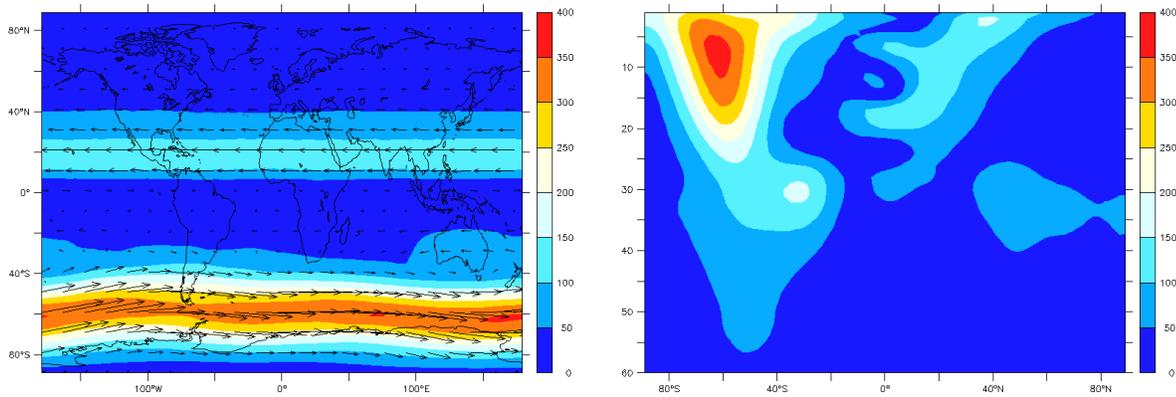


Fig. III.3.4 : À gauche : intensité (couleur, en km/h) et direction (flèches) des vents horizontaux au niveau de pression 10 hPa (correspondant au niveau 14 de la grille verticale de MOCAGE). À droite : moyenne zonale de l'intensité du vent (en km/h), en fonction de la latitude et des niveaux de contrôle. Les vents sont obtenus par interpolation des fichiers de forçage provenant des analyses opérationnelles du CEPMMT sur la configuration de MOCAGE avec grille horizontale régulière 2° par 2° et grille verticale avec 60 niveaux. Ils sont moyennés sur le mois d'août 2007.

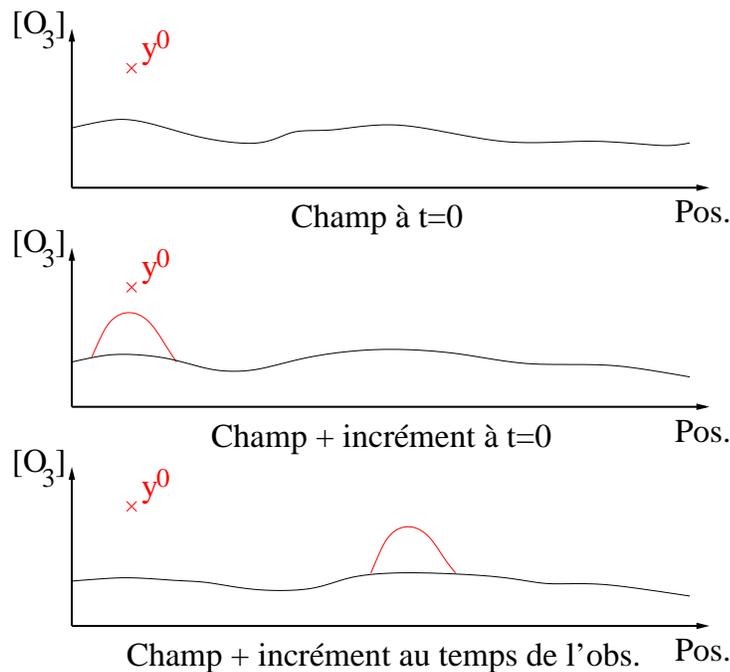


Fig. III.3.5 : Illustration du transport de l'incrément entre le temps $t = 0$ et le temps de l'observation. La courbe noire représente la concentration du champ d'ozone le long d'une droite suivant la direction du vent dominant. y^0 représente la concentration et la position de l'observation. La courbe rouge représente l'incrément apporté au champ d'ozone au temps $t = 0$ puis au temps de l'observation.

processus de minimisation est donc responsable de l'augmentation des biais et des écarts-types dans les zones à dynamique rapide. Cette explication révèle que le même comportement existe sans l'utilisation de l'algorithme de la boucle externe. Cependant, comme il n'y a qu'une seule analyse, le déplacement de l'incrément hors des zones observées qui aurait lieu lors d'une seconde propagation du modèle n'est pas visible dans les biais et les écarts-types.

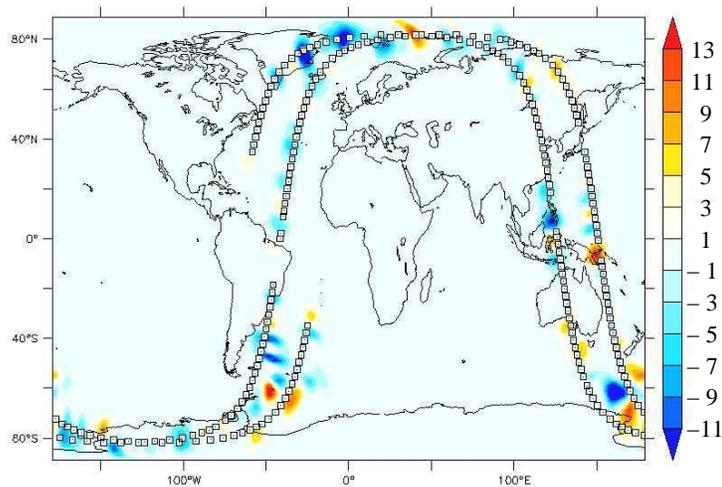


Fig. III.3.6 : Différence (en DU) entre les colonnes totales du 27 août 2007 à 06 UTC issues d'une prévision à partir de l'analyse et celles issues d'une prévision à partir de l'ébauche. Les carrés représentent les positions des observations assimilées pour construire l'analyse. L'assimilation de MLS a été réalisée avec 3 itérations de la boucle externe.

La FIG. III.3.6 étaye l'explication que l'on vient de fournir. En effet, elle représente les différences (en DU) entre les colonnes totales issues d'une prévision à 3 h à partir de l'analyse et celles issues d'une prévision à 3 h à partir de l'ébauche. Cette différence correspond à l'incrément apporté au modèle et propagé pendant les 3 h de la fenêtre d'assimilation. L'incrément propagé peut se situer nettement décalé par rapport aux positions des observations, représentées ici par des carrés. La distance de cet écart entre l'incrément propagé et les positions des observations se distingue particulièrement dans le vortex polaire et la direction de l'écart suit bien le sens des vents horizontaux de la FIG. III.3.4 (d'ouest en est au pôle sud).

3.2 Article publié au journal *Mon. Wea. Rev.*

Nous avons souhaité creuser plus en détails les causes des comportements observés dans l'étude que j'ai réalisée dans la section précédente. Le travail ainsi réalisé a donné lieu à l'écriture d'un article publié au journal *Monthly Weather Review* le 17 août 2010. Dans cette section, nous résumons et présentons cet article.

3.2.1 Résumé de l'article

L'assimilation de données variationnelle 3D-FGAT apparaît être un bon compromis entre la précision et le temps de calcul total. En termes de besoins informatiques, elle est moins gourmande que la méthode 4D-Var puisque l'incrément n'est pas propagé dans le temps par un modèle. Cependant, la comparaison entre le modèle et les observations est toujours calculée au temps exact de l'observation, contrairement au 3D-Var. Une caractéristique intéressante du 4D-Var est le processus itératif, aussi connu en tant que boucle externe. L'algorithme de la boucle externe peut aussi être utilisé en conjonction avec le 3D-FGAT. Mais cela nécessite l'application de l'incrément d'analyse au début de la fenêtre d'assimilation.

Les avantages et les inconvénients de l'utilisation de cette variante inhabituelle du 3D-FGAT sont illustrées dans cette publication sur deux applications centrées sur le transport, l'un des

phénomènes principaux contrôlant l'évolution atmosphérique. La première application consiste en l'advection uni-dimensionnelle d'un traceur passif. Par trois situations représentatives, on démontre les bénéfices de la boucle externe, exception faite des situations pratiques dominées par une dynamique très rapide tel qu'un vent zonal de 50 m.s^{-1} sur le cercle équatorial, lorsque la fenêtre d'assimilation est de 3 h. La seconde application consiste en l'assimilation avec la méthode 3D-FGAT de véritables mesures d'ozone à l'intérieur d'un modèle de Chimie-Transport. Cette application confirme les résultats précédents, montrant que l'analyse du 3D-FGAT avec la boucle externe produit une surestimation de l'incrément d'ozone dans les régions où la vitesse du vent est importante comparée à la distance parcourue par les particules atmosphériques pendant la durée de la fenêtre d'assimilation.

3.2.2 Article

On the Merits of Using a 3D-FGAT Assimilation Scheme with an Outer Loop for Atmospheric Situations Governed by Transport

SÉBASTIEN MASSART, BENJAMIN PAJOT, AND ANDREA PIACENTINI

CERFACS/SUC CNRS-URA 1875, Toulouse, France

OLIVIER PANNEKOUCKE

CNRM/GAME, Météo-France/CNRS, Toulouse, France

(Manuscript received 22 September 2009, in final form 17 August 2010)

ABSTRACT

Three-dimensional variational data assimilation (3D-Var) with the first guess at appropriate time (FGAT) appears to be an attractive compromise between accuracy and overall computing time. It is computationally cheaper than four-dimensional (4D)-Var as the increment is not propagated back and forth in time by a model, yet the comparison between the model and the observations is still computed at the right observation time. An interesting feature of the 4D-Var is the iterative process known as the outer loop. This outer-loop approach can also be used in conjunction with 3D-FGAT. But it requires the application of the 3D-FGAT analysis increment at the beginning of the assimilation window.

The pros and cons of using this unusual 3D-FGAT variant are illustrated in this paper on two applications focused on the transport, one of the main phenomena governing the atmospheric evolution. The first one is the one-dimensional advection of a passive tracer. By three representative situations, it shows the benefits of the outer loop, except for practical situations driven by very rapid dynamics such as a zonal wind of 50 m s^{-1} on the earth's great circle, when the assimilation window has a size of 3 h. The second application is the 3D-FGAT assimilation of true ozone measurements into a chemical-transport model. It confirms the previous results, showing that the 3D-FGAT analysis with the outer loop produces an overestimation of the ozone increment in regions where the wind speed is high compared to the time length of the assimilation window.

1. Introduction

In geosciences, data assimilation designates the process in which different kinds of observations distributed in time and space are merged together with a dynamical numerical model (Talagrand 1997). Its aim is to determine as accurately as possible the state of the modeled phenomenon. Data assimilation was initially related to the necessity of defining the initial state of numerical weather prediction (NWP) models dealing with strong nonlinearities. In its beginning, data assimilation was considered to be a sequence of corrections performed at successive observation times (Gandin 1963; Kalman 1960). At every observation time, the corrections were computed according to the available observations and were added to the model solution. This approach has changed with the

variational methods. The idea of applying variational methods in meteorology dates back to the 1960s (Sasaki 1958, 1970). Variational methods and in particular four-dimensional variational data assimilation (4D-Var) provided an alternative approach that globally adjusts the model solution to fit the complete set of the observations available in a given time interval called the assimilation window. Since the early 1980s, this approach has taken advantage of the use of an adjoint equation to compute the gradient of the cost function and then iteratively solve the variational minimization problem. The variational approach was then successfully applied in the mid-1980s to data assimilation problems in the context of nonlinear dynamical models (Talagrand and Courtier 1987; Courtier and Talagrand 1987). The methodology was later rapidly exported both to operational meteorological centers and to other geophysical domains, such as oceanography (Thacker and Long 1988; Bennett 2002) and atmospheric chemistry (Fisher and Lary 1995; Elbern et al. 1997).

Corresponding author address: Sébastien Massart, CERFACS
42, avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse, France.
E-mail: massart@cerfacs.fr

In the 1990s, one main objective for operational implementations was to reduce 4D-Var calculations to an affordable level of computational time. For example, Courtier et al. (1994) report that, in 1994 at the European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF), 4D-Var assimilation on a 24-h window, with 30 minimizer iterations, required as much computational time as the integration of 100 days of the direct model. This period was dedicated to finding low-cost assimilation solutions such as three-dimensional variational data assimilation (3D-Var; Courtier et al. 1998). The 3D-Var with the first guess at appropriate time (3D-FGAT) also appeared and was shown to be superior to 3D-Var (Fisher and Andersson 2001). Contrary to 3D-Var, it propagates in time the background (or prior estimate) state with the complete forecast model in order to compare this state to the observations at the observation time, as in 4D-Var. Another lower-cost solution proposed by Courtier et al. (1994) is an incremental approach based on a 4D-Var in terms of increments. In the 4D-Var incremental approach, the minimization process uses an increment that is propagated with a linear model instead of the complete forecast model. This version requires the linearization of the assimilation operators, which is carried on in the vicinity of the first guess. This first guess is usually the prior estimate (or the background) state. But the solution of the linearized optimization problem can be used as a new first-guess point where to linearize the assimilation operators (instead of the prior estimate state). This gives rise to a new linear problem to solve. This operation can be iteratively repeated: this procedure refers to introducing use of an outer loop. At each iteration of this outer loop, one can use a different simplified linear propagation model. Because a simple linear model may spectacularly reduce the cost of the assimilation, the complexity of the model is usually increased with the number of the iteration.

Simplified linear models applied with the incremental 4D-Var are commonly obtained by omitting some physical process or using a lower spatial resolution (Courtier et al. 1994). The simplest linear model is the identity matrix. The choice of the identity matrix instead of a linearized forecast model to propagate the increment is the basis of the 3D-FGAT, which is of particular interest because the tangent linear and adjoint model integrations explain most of the total computing cost of 4D-Var (Gauthier et al. 2007). This makes 3D-FGAT a hybrid method between 4D-Var and 3D-Var. 3D-FGAT is a useful method since it does not need the adjoint of the linearized propagation model. It is a nonnegligible advantage since, for many applications, the adjoint of the linearized propagation model is not immediately or

easily available. 3D-FGAT is in addition more precise than 3D-Var (Lorenc and Rawlins 2005; Laroche et al. 2007). Within 3D-FGAT, the misfit between the model and the observations is computed at the real observation times while 3D-Var uses a single synoptic observation time per assimilation window. Being ordinarily a 4D-Var feature, the outer loop can also be a 3D-FGAT one. In such a case, the 3D-FGAT analysis increment is necessarily added at the beginning of the assimilation window, which results in a 3D-FGAT variant. All the more, the 3D-FGAT analysis increment is normally added at the middle of the assimilation window.

Even if computers are more and more powerful, having a cheaper assimilation method than 4D-Var and a more precise one than 3D-Var is still pertinent. As an example, 3D-FGAT is relevant for providing reanalyses of the chemical atmospheric composition over long periods, which is useful for trends estimation and to detect the signature of the climate change on the composition of the atmosphere. As the transport is one of the main physical processes that control the atmosphere and in particular its chemical composition, this study is dedicated to phenomena whose evolution is governed by the dynamics. It aims to illustrate with two models, the pros and cons in this context, of the 3D-FGAT variant using the outer loop. The first model simulates the one-dimensional advection of a passive tracer. Section 3 of this paper presents this model and its use to demonstrate the particular behavior of the 3D-FGAT with the outer loop in three specific situations: the first one is the assimilation using a nonlinear observation operator, the second one concerns the selection of the assimilated observations, and the last one is a situation that presents high advection velocities. The second model is a comprehensive Chemistry-Transport Model (CTM). Section 4 describes a situation encountered while assimilating real data in this CTM using a 3D-FGAT method with the outer loop. Section 2 provides the theoretical background by introducing the variational data assimilation methods with emphasis on the outer loop. Finally, the conclusions are presented in section 5.

2. Variational data assimilation

Variational assimilation aims at globally adjusting a model solution to all the observations available over a given time interval named assimilation window. Most variational algorithms define a scalar function that, for any model solution over the assimilation window, measures a weighted distance between that solution and the available observations, and between that solution and a prior estimate of the true solution. That so-called objective or cost function is the foundation of 4D-Var.

DECEMBER 2010

MASSART ET AL.

4511

Variational methods exist in a variety of formulations. We present hereafter the variant form of the 4D-Var cost function in terms of increments, the outer loop, and the FGAT formulations.

a. 4D-Var in terms of increments

4D-Var aims at providing the best estimate \mathbf{x}^a of the unknown true state \mathbf{x}^t at t_0 , the initial time of the assimilation window. This estimate, referred to as analysis, is a particular initial condition of the propagation (or forecast) model \mathcal{M} . It is computed using the observations \mathbf{y}_o available over the time interval $[t_0, t_P]$, where t_P is the final time of the assimilation window. The model solution $\mathbf{x}(t_i)$ at the observation time t_i is compared to the observations $\mathbf{y}_o(t_i)$ via the observation operator \mathcal{H}_i . The 4D-Var cost function is

$$\begin{aligned} \mathcal{J}[\mathbf{x}(t_0)] = & \frac{1}{2} [\mathbf{x}(t_0) - \mathbf{x}_b]^T \mathbf{B}_0^{-1} [\mathbf{x}(t_0) - \mathbf{x}_b] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^P [\mathbf{y}_o(t_i) - \mathcal{H}_i \mathbf{x}(t_i)]^T \mathbf{R}_i^{-1} [\mathbf{y}_o(t_i) - \mathcal{H}_i \mathbf{x}(t_i)], \end{aligned} \quad (1)$$

where the background (or prior estimate) field \mathbf{x}_b is an estimate of the true state with an error derived from the realization of an unbiased random variable of covariance \mathbf{B}_0 . The instrumental and representativeness observation errors are included in the covariance matrices \mathbf{R}_i (Lorenz 1986). The model state $\mathbf{x}(t_i)$ at the observation time t_i is the propagation of the initial state $\mathbf{x}(t_0)$ via the operator \mathcal{M}_i :

$$\mathbf{x}(t_i) = \mathcal{M}_i \mathbf{x}(t_0). \quad (2)$$

Courtier et al. (1994) proposed a formulation of the 4D-Var cost function in terms of increments. The increment $\delta\mathbf{x}(t_0)$ is the difference between the initial and the background states, $\delta\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}(t_0) - \mathbf{x}_b$. Their formulation assumes that the tangent linear operators \mathbf{M}_i and \mathbf{H}_i of \mathcal{M}_i and \mathcal{H}_i , respectively, satisfy

$$\mathcal{M}_i[\mathbf{x}(t_0) + \delta\mathbf{x}(t_0)] \approx \mathcal{M}_i \mathbf{x}(t_0) + \mathbf{M}_i \delta\mathbf{x}(t_0), \quad (3)$$

$$\mathcal{H}_i[\mathbf{x}(t_i) + \delta\mathbf{x}(t_i)] \approx \mathcal{H}_i \mathbf{x}(t_i) + \mathbf{H}_i \delta\mathbf{x}(t_i), \quad (4)$$

for acceptable magnitude of the perturbations $\delta\mathbf{x}(t_0)$ and $\delta\mathbf{x}(t_i)$. Under the linearity hypothesis whose validity is discussed in Tremolet (2004), Eqs. (3) and (4) are exact. When the assimilation operators are at most weakly nonlinear during the assimilation window, assuming Eqs. (3) and (4) are suitable approximations, one can express the model equivalent of the observations as a function of the following increment:

$$\mathcal{H}_i \mathcal{M}_i \mathbf{x}(t_0) = \mathcal{H}_i \mathcal{M}_i \mathbf{x}_b + \mathbf{H}_i \mathbf{M}_i \delta\mathbf{x}(t_0). \quad (5)$$

Under this linear approximation, the nonlinear cost function of Eq. (1) is approximated by the linear cost function:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}[\delta\mathbf{x}(t_0)] = & \frac{1}{2} \delta\mathbf{x}(t_0)^T \mathbf{B}_0^{-1} \delta\mathbf{x}(t_0) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^P [\mathbf{d}(t_i) - \delta\mathbf{y}(t_i)]^T \mathbf{R}_i^{-1} [\mathbf{d}(t_i) - \delta\mathbf{y}(t_i)]. \end{aligned} \quad (6)$$

Here $\delta\mathbf{y}(t_i) = \mathbf{H}_i \mathbf{M}_i \delta\mathbf{x}(t_0)$ and $\mathbf{d}(t_i)$ is the innovation vector at observation time t_i , which represents the distance between the observations and the background state propagated at t_i with the nonlinear model, and projected in the observation space with the nonlinear observation operator:

$$\mathbf{d}(t_i) = \mathbf{y}_o(t_i) - \mathcal{H}_i \mathcal{M}_i \mathbf{x}_b. \quad (7)$$

The solution of the assimilation problem is obtained by computing the increment $\delta\mathbf{x}_a(t_0)$ that minimizes the cost function of Eq. (6). The analysis field $\mathbf{x}_a(t_0)$ is the sum of this increment and the background state, $\mathbf{x}_a(t_0) = \mathbf{x}_b + \delta\mathbf{x}_a(t_0)$. In practical applications, the minimum of Eq. (6) is computed by a minimization algorithm that generally requires the gradient of the cost function. The gradient is usually computed using adjoint methods. Nevertheless, the minimum of Eq. (6) can be expressed analytically by looking at the solution that nullifies the gradient. One can demonstrate that the solution is

$$\mathbf{x}_a(t_0) = \mathbf{x}_b + \mathbf{K}^{4D} [\mathbf{y}_o - \mathcal{H} \mathcal{M} \mathbf{x}_b], \quad (8)$$

with

$$\mathbf{K}^{4D} = \mathbf{B} \mathbf{M}^T \mathbf{H}^T [\mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{M}^T \mathbf{H}^T + \mathbf{R}]^{-1}, \quad (9)$$

where \mathbf{y}_o is the generalized observation vector that contains all the observations available over the assimilation interval; \mathbf{B} and \mathbf{R} are the generalized covariance matrices of background and observation errors, respectively. In the same way, \mathcal{M} and \mathcal{H} are the generalization of \mathcal{M}_i and \mathcal{H}_i , with their tangent linear form \mathbf{M} and \mathbf{H} , respectively. Equations (8) and (9) establish the link between the linear form of 4D-Var in terms of increments and the statistical estimation approach, as it also represents the analysis step of the extended Kalman filter (Maybeck 1979).

b. The outer loop

The 4D-Var in terms of increments requires us to linearize the assimilation operators \mathcal{M} and \mathcal{H} . The first

time, the linearization is computed in the vicinity of the background. It leads to the quadratic cost function of Eq. (6). The minimization of this function results in a first analysis. In a second step, this analysis can be used as a new guess in the vicinity of which to linearize the assimilation operators. This leads to a new cost function to minimize, which results in a new analysis. This iterative process is commonly denoted the “outer loop.” Its aim is to approach the minimum of the nonlinear 4D-Var cost function with a succession of quadratic cost functions minimizations.

For the outer-loop formulation, the solution $\mathbf{x}^n(t_0)$ of the iteration n is searched as an increment $\delta\mathbf{x}^n(t_0)$ to be applied to the analysis $\mathbf{x}_a^{n-1}(t_0)$ resulting from the previous iteration:

$$\mathbf{x}^n(t_0) = \mathbf{x}_a^{n-1}(t_0) + \delta\mathbf{x}^n(t_0). \quad (10)$$

The analysis of Eq. (10) is then propagated in time by the nonlinear forecast model in order to be compared to the observations. In terms of increments, the model equivalent of the observations is expressed as

$$\mathcal{H}_i \mathcal{M}_i \mathbf{x}^n(t_0) = \mathcal{H}_i \mathcal{M}_i \mathbf{x}_a^{n-1}(t_0) + \mathbf{H}_i^n \mathbf{M}_i^n \delta\mathbf{x}^n(t_0), \quad (11)$$

where \mathbf{H}_i^n and \mathbf{M}_i^n denote, respectively, the linear observation operator and the linear model used for the iteration n . The linear model can differ from the tangent linear of \mathcal{M} and can differ from one iteration to another. This is the basis of incremental variational methods. In practical applications, \mathbf{M}^n is the tangent linear of \mathcal{M}^n where \mathcal{M}^n is a version of \mathcal{M} , which can have a coarser horizontal resolution and could reflect a less detailed description of the physical laws.

At each iteration n , observations are compared to the best current estimate of the true state. This is another key point of the outer-loop process. Actually, at iteration n , observations are compared to the first guess \mathbf{x}_a^{n-1} . This current guess is the best estimate of the true state given the linear estimation of the previous iteration $n - 1$; thus, it is updated at each iteration. The innovation vector at time t_i is then the difference between the observations and the model equivalent of the state \mathbf{x}_a^{n-1} given by Eq. (11):

$$\mathbf{d}^n(t_i) = \mathbf{y}_o(t_i) - \mathcal{H}_i \mathcal{M}_i \mathbf{x}_a^{n-1}(t_0). \quad (12)$$

As previously described and as explained by Courtier et al. (1994), the outer loop was initially used to reduce the cost of the assimilation process. But the outer loop presents other interesting characteristics. It can be seen as a way to iteratively solve a nonlinear problem by a succession of (simpler) linear problems: successive

linearizations of the assimilation operators are recomputed around an updated trajectory that gets closer to the truth at every iteration. The current analysis increment becomes progressively smaller and therefore compliant with the linearity hypothesis. For these reasons, we aim at using the outer loop in conjunction with a cheaper method than 4D-Var.

c. 3D-FGAT with the outer loop

In the incremental approach proposed by Courtier et al. (1994), the linear model \mathbf{M} can differ from the tangent linear of \mathcal{M} . The FGAT approach represents an extreme case where the linear model \mathbf{M} is replaced by the identity matrix in Eq. (5), which implies

$$\mathcal{H}_i \mathcal{M}_i(\mathbf{x}_b + \delta\mathbf{x}) = \mathcal{H}_i \mathcal{M}_i \mathbf{x}_b + \mathbf{H}_i \delta\mathbf{x}, \quad (13)$$

and the increment $\delta\mathbf{x}$ is no longer propagated in time. The 3D-FGAT method loses the dynamical aspect of the 4D-Var and is thus classified as a 3D variational method. The background state is still compared to observations at the observation time (i.e., the appropriated one) by Eq. (7). As the linear propagator is the identity matrix, the 3D-FGAT produces a static increment. According to Fisher and Andersson (2001), the valid time of the increment obtained by the classic 3D-FGAT (without the outer loop) is the central time of the window (not the initial time as in 4D-Var). Applying roughly the 3D-FGAT (or the 3D-VAR) analysis increment at the central time may cause a chock response of the model. To avoid this chock, the increment may be distributed around the central time for example by digital filters (Fillion et al. 1995), incremental digital filters (Gauthier and Thépaut 2001), or the incremental analysis update approach (Bloom et al. 1996).

To perform an outer loop with the 3D-FGAT, the increment has to be applied at the initial time, so to compute the misfit between the new first guess $\mathbf{x}_a^{n-1}(t_0)$ and the observations at the observation time by Eq. (12). Using Eq. (13), we rewrite the cost function of Eq. (6), so the 3D-FGAT cost function at the iteration n is

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^{\text{FGAT}}(\delta\mathbf{x}^n) &= \frac{1}{2} [\delta\mathbf{x}^n + \delta\mathbf{x}_b^n]^T \mathbf{B}_0^{-1} [\delta\mathbf{x}^n + \delta\mathbf{x}_b^n] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=0}^P [\mathbf{d}^n(t_i) - \mathbf{H}_i^n \delta\mathbf{x}^n]^T \\ &\times \mathbf{R}_i^{-1} [\mathbf{d}^n(t_i) - \mathbf{H}_i^n \delta\mathbf{x}^n], \end{aligned} \quad (14)$$

where $\delta\mathbf{x}_a^n = 0$ for the first iteration and $\delta\mathbf{x}_a^n = \delta\mathbf{x}_a^{n-1}(t_0) - \mathbf{x}_b$ afterward. The minimization of the cost function of Eq. (14) produces the analysis increment $\delta\mathbf{x}_a^n(t_0)$ and therefore an analysis $\mathbf{x}_a^n(t_0) = \mathbf{x}_a^{n-1}(t_0) + \delta\mathbf{x}_a^n(t_0)$. This 3D-FGAT variant with the correction time placed at the

beginning of the assimilation window will hereafter be simply referred to as 3D-FGAT. This variant makes the aforementioned filtering techniques that distribute the increment around the central time not appropriate as well. Moreover, as the data distribution is obviously more likely to be about the middle time, the expected consequence for this 3D-FGAT variant is that it will be penalized by the observations localized at the end of the window. Indeed, the time inconsistency between the propagated guess and the observations may introduce large errors in the innovation vector. This paper does not detail the differences between the classic 3D-FGAT and the 3D-FGAT with the increment applied at the beginning of the assimilation window. Nevertheless, their results should not be too different under conditions of weak enough impact from flow dependence over the assimilation window. Moreover, both would be deficient compared to 4D-Var under conditions of fast flow.

In the general nonlinear case, it is not possible to have an analytic expression of both 4D-Var and 3D-FGAT analyses as a function of the iteration of the outer loop. But, in the linear case, the 4D-Var solution is given by Eq. (8). The solution is found at the first iteration and does not change with the next iterations. However, this does not hold for 3D-FGAT (except if the model is the identity) as its solution depends on the iteration. The solution at the n th iteration is

$$\mathbf{x}_a^n = \mathbf{x}_b + \mathbf{K}^{\text{FGAT}}[\mathbf{y}_o - \mathbf{H}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a^{n-1}) - \mathbf{H}\mathbf{M}\mathbf{x}_a^{n-1}], \quad (15)$$

where \mathbf{K}^{FGAT} is a gain matrix that does not contain the linear propagator \mathbf{M} :

$$\mathbf{K}^{\text{FGAT}} = \mathbf{B}\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}. \quad (16)$$

Equation (15) shows that the convergence value of the iterative 3D-FGAT is not the 4D-Var solution even in the linear context. The first guess \mathbf{x}_a^{n-1} is propagated by the model \mathbf{M} , while the increment $\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a^{n-1}$ is not propagated. It indeed shows there are two differences between 4D-Var (in terms of increments) gain of Eq. (9) and 3D-FGAT gain of Eq. (16). One is that background errors are flow dependent in 4D-Var since they are represented by $\mathbf{M}\mathbf{B}\mathbf{M}^T$. The second one is that, in 4D-Var, the gain matrix included a backward propagation in time thanks to \mathbf{M}^T . Neither of these flow-dependent effects occurs in 3D-FGAT. When the methods are compared, it is difficult to identify which of the two aspects predominates.

In the next section, we propose an example where only the second aspect occurs. The illustration focuses on the outer loop and shows that, even if the iterative 3D-FGAT analyses differ from the 4D-Var analyses, the

use of the outer loop with 3D-FGAT is relevant. Actually, we illustrate that the interesting properties of the outer loop may be advantageous for the 3D-FGAT analysis. But, the outer loop can also cause a deficiency in the 3D-FGAT analysis in situations driven by rapid dynamics compared to the temporal size of the assimilation window.

3. Illustration on a circle

Some practical applications of using the outer loop with the 3D-FGAT are illustrated using a circular one-dimensional domain where the forecast model simulates the advection with a velocity \mathbf{u} of a passive tracer with the concentration $\mathbf{x}(\eta, t)$, along the one-dimensional axis referred to herein as the coordinate η . This forecast model is based on the following equation:

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} + \mathbf{u}(\eta) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \eta} = 0. \quad (17)$$

It aims at reproducing one of the major processes governing the atmosphere and its chemical composition.

To evaluate the merits of the outer loop, we set up a twin experiment in which the assimilated observations are synthetic (computed starting from a perturbation of a model state) and the true state is known. Three applications are illustrated in the sections following the descriptions of the numerical experiments.

a. Description of the numerical experiments

The numerical model described by Eq. (17) is used in the particular case of a constant velocity and for a circular domain of radius 6380 km, which corresponds to the earth's great circle. The circle is divided into 445 evenly spaced grid points. In such a situation, Eq. (17) is reduced to a simple translation. The length of the time step is adjusted with the velocity so the field is translated over an integer number of grid points. This limits the numerical diffusion due to the numerical scheme and grants interesting properties of the propagator \mathbf{M} like $\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{M}^T$ (see the appendix for further details).

The background \mathbf{x}_b of the concentration of the passive tracer has a sinusoidal shape with a period equal to the half of the domain length, a mean equal to unity, and an amplitude of 0.1 (Fig. 1). A true state is built by adding to \mathbf{x}_b a random Gaussian noise with a zero mean and a covariance matrix equal to the covariance matrix of the background errors. The standard deviation of the background errors is constant in space with its value set to 0.1. The correlations of the background errors are Gaussian with a length scale of 500 km. The knowledge of the true state allows us to build synthetic observations. The

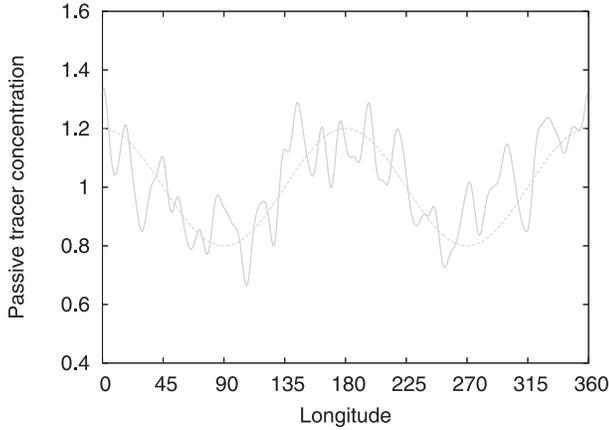


FIG. 1. Concentration of the passive tracer along the equatorial circle at the initial time: true state (solid gray line) and background state (dotted gray line).

observation operator selects the value of the tracer's concentration at the grid point where the observation is available. The observations are built by applying the observation operator to the true state and by adding a Gaussian distributed random noise with zero mean and a standard deviation also set to 0.1. There is no correlation applied between observation errors.

In our particular case of a constant velocity and a homogeneous covariance matrix of the background errors, according to Eq. (A3), the gain of Eq. (9) associated with 4D-Var becomes

$$\mathbf{K}^{4D} = \mathbf{B}\mathbf{M}^T\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}. \quad (18)$$

The relation $\mathbf{B}\mathbf{M}^T = \mathbf{M}^T\mathbf{B}$ can be derived from Eqs. (A2) and (A3) and leads to the equivalent expression of the following gain:

$$\mathbf{K}^{4D} = \mathbf{M}^T\mathbf{B}\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}. \quad (19)$$

According to Eq. (16), expressing the gain in the 3D-FGAT case, there is a direct link with this 4D-Var gain under the previously described assumptions:

$$\mathbf{K}^{4D} = \mathbf{M}^T\mathbf{K}^{FGAT}. \quad (20)$$

This relation shows that in our pure advection case with a homogeneous \mathbf{B} matrix, the analysis increment is the same for the 4D-Var and 3D-FGAT methods, but with a shift due to the adjoint (or inverse) model.

b. Using a nonlinear observation operator

A justification of using the outer loop with a 3D-FGAT assimilation scheme is the potential to relinearize each operator around a better estimate of the truth.

In our case where the forecast model is linear, we illustrate the effect of the outer loop while using a nonlinear observation operator. The illustration simulates the assimilation of the radiance. According to the Beer–Lambert law, the radiation absorbed by the total atmospheric column of a chemical species with a concentration $C(z)$ at the altitude z is proportional to the optical length τ :

$$\tau = \tau_0 \exp\left[-\frac{1}{\sigma} \int_0^\infty C(z) dz\right]. \quad (21)$$

Here $\int_0^\infty C(z) dz$ is the total column of the chemical species and σ is the absorption cross section of the species. As an example, choosing the ozone as the gas, τ represents the UV absorption.

Since there is no vertical component in our one-dimensional model, we simulate the total column by the state vector \mathbf{x} . Assuming that $\tau_0 = 1$ and $\sigma = 1$ leads to the nonlinear observation operator:

$$\mathcal{H}_i: \mathbf{x}(t_i) \rightarrow \mathbf{y}(t_i) = e^{-\mathbf{x}(t_i)}. \quad (22)$$

In this experiment, we randomly choose 89 observations evenly spaced (every fifth grid point). The observations are assumed to be all measured at the end of a 3-h assimilation window (Fig. 2a). The observation operator consists here in (i) a projection of the state with the operator of Eq. (22) onto a space we will name observation space for simplicity, and (ii) a selection at the grid point where the observation is available. The velocity is constant with a value of 50 m s^{-1} .

We performed 10 iterations of the outer loop, refreshing the linearization of the observation operator at every iteration. For each iteration, we computed the standard deviation over the whole assimilation window of the current analysis minus the true state. This standard deviation is normalized by the one computed from the difference between the background and the true states. In this example, the standard deviation decreases with the iteration number and becomes almost constant after six iterations (Fig. 2c). The first analysis already provides a good estimation of the truth but with the increase in the number of outer iterations, the structures of the fields are better positioned and have a better amplitude compared to the truth (Fig. 2b). This illustrates the improvement coming from the update of the linearization origin in the outer loop when the assimilation problem is not linear.

c. The observation screening

As the 3D-FGAT requires the linearization of the assimilation operators, the increment has to be small

DECEMBER 2010

MASSART ET AL.

4515

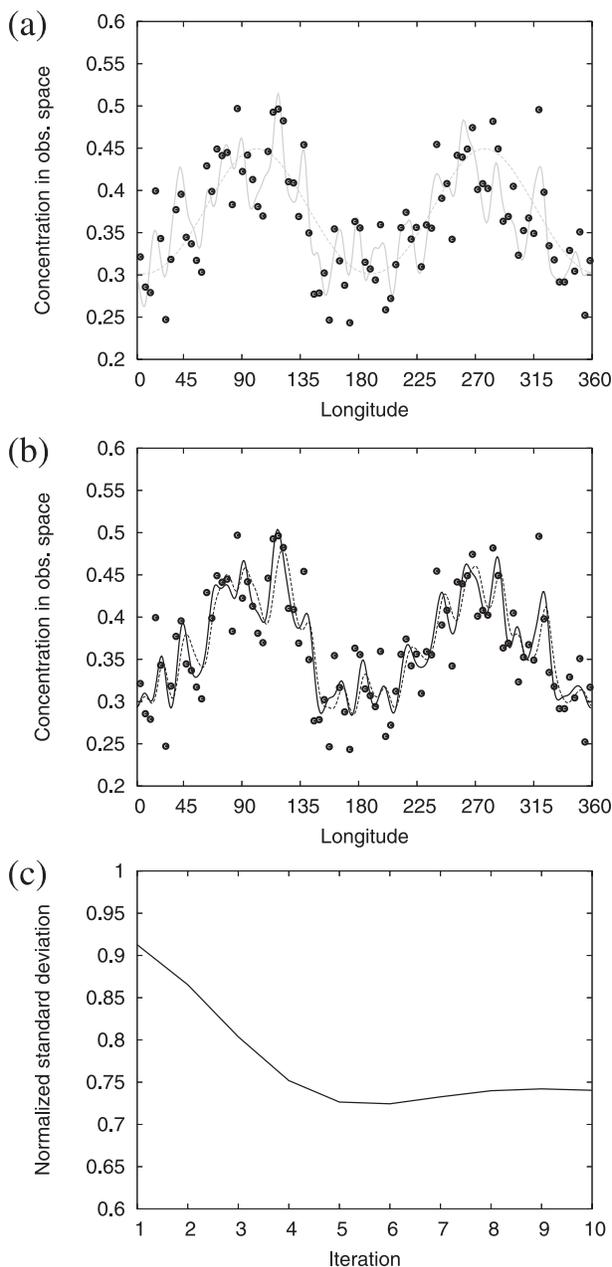


FIG. 2. Illustration of the outer loop for the case of a nonlinear observation operator. (a) As in Fig. 1, but in the observation space, at the observation time, and 3 h later after an advection with a velocity of 50 m s^{-1} . The dots represent the observations. (b) As in (a), but for the analyzed field at the first (dotted line) and the last (solid line) iteration of the outer loop. (c) Normalized standard deviation of the difference between the analysis and the truth as a function of the iteration of the outer loop.

enough to stay in the linearization validity region. A useful way to limit the amplitude of the increment is to proceed to a data selection by keeping those that are not too far from the background state (projected in the observation space). This is known as observation screening.

The observation screening is also a mean to detect suspicious measurements and to remove the bad ones from the assimilated dataset.

The observations to be assimilated can be selected first of all when the background is integrated in time with the full propagation model and through the (possibly nonlinear) observation operators. The fact that removed data are far from the background means that some of them are doubtful or that the background is inappropriate. The outer loop produces a new first guess at each iteration. Expecting that the first guess is closer and closer to the truth, it can be used at each iteration to proceed to a new data selection. The removed observations that remain are therefore those that are doubtful, the first guess being no longer inappropriate. The outer loop here offers a chance to inject new observations in the assimilation process while still rejecting the bad ones.

We illustrate this property with the one-dimensional advection model. The variance of the background departure of Eq. (12) can be estimated as a sum of observation and background errors variances, assuming that the observation and the background errors are uncorrelated. In the observation screening, the square of the background departure may be considered as suspect when it exceeds its expected variance. In our example, the observation and background error standard deviations are both equal to 0.1: it makes a departure suspect if its standard deviation exceeds 0.14. To impose a looser criterion, we considered observations with a departure lower than 0.2.

Because of the construction of the twin experiment, most of the synthetic observations satisfy this criteria. We thus decided to keep the previous background state but to compute a new truth by adding to the previous one a random bias with a mean of -0.2 and a standard deviation of 0.1. The 89 computed observations are based on this new truth and are still evenly spaced and measured at the end of a 3-h assimilation window (Fig. 3a). This aims at simulating an atmospheric situation where the forecast model misses something, an important decrease in the concentrations over the whole domain in this particular example. In the proposed illustration, the observation operator exists only in a selection and the velocity is still constant with a value of 50 m s^{-1} .

We chose to compare two experiments: one using the same set of 69 observations selected thanks the background and one with a dynamic screening based on the current first guess of the iteration of the outer loop. As previously, we computed the normalized the standard deviation of the difference between the analysis and the truth. Even if the outer loop reduces this standard deviation when keeping the same number of observations, the reduction is increased when new observations are

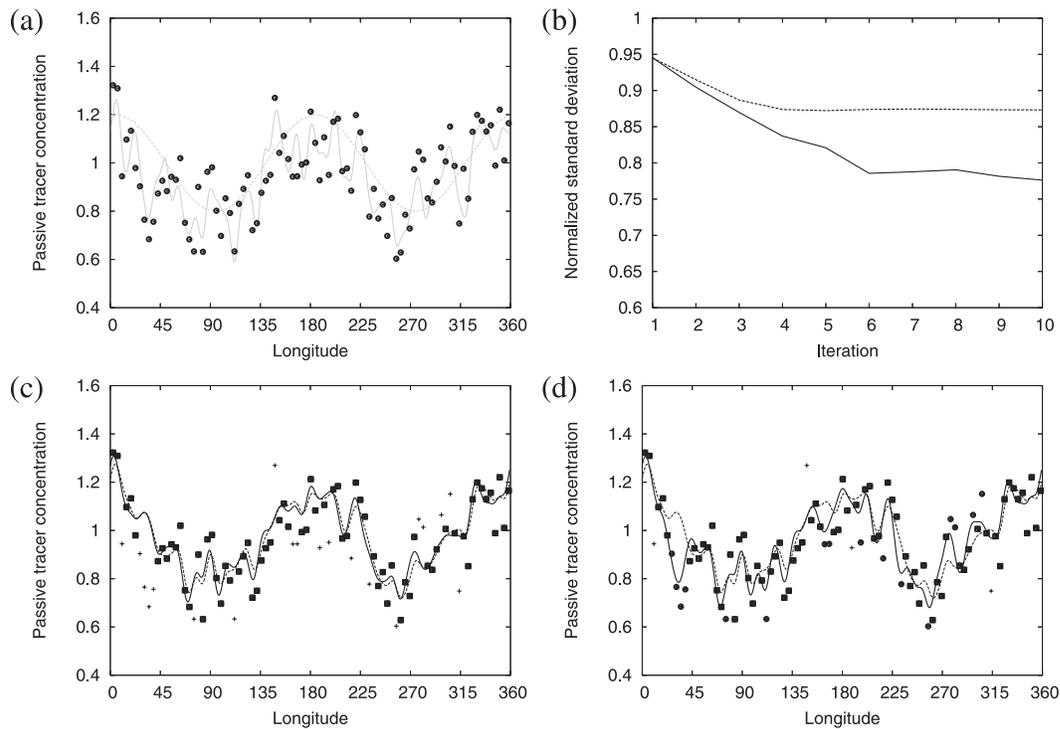


FIG. 3. Illustration of the outer loop for the case of an observation screening. (a) As in Fig. 1, but at the observation time and 3 h later after an advection with a velocity of 50 m s^{-1} . (b) Normalized standard deviation of the difference between the analysis with updated screening (solid line) and with fixed screening (dotted line) and the truth as a function of the iteration of the outer loop. (c) As in (a), but for the analysis with fixed screening at the first (dotted line) and the last (solid line) iteration of the outer loop. (d) As in (c), but for the analysis with updated screening. In (c) and (d), the squares represent the assimilated observations at the first iteration, the dots represent the added assimilated observations at the last iteration and the crosses represent the rejected ones.

added to the assimilation process (Fig. 3b). In this example, the outer loop allows to add progressively 16 more observations over 89 available (Table 1), ignoring as expected the bad ones. For the first iteration of the outer loop, the analysis fields are by construction the same in the cases of a constant screening and an updated one. Most of the rejected observations have a value lower than the background value that is coherent with the negative bias used to build the observations (Figs. 3b,c). But only the case with the updated screening is able to catch these observations after several iterations of the outer loop. This illustrates the improvement coming from the update of the screening in the outer loop when the background state is inappropriate.

d. Situations governed by dynamical effects

In the pure advection case with a constant velocity, the model gets more and more different from the identity with the increase of the velocity. In the presence of high velocities, the 3D-FGAT assumptions reach the limits of their validity. We will show how the use of the outer loop acts in this case. To separate the dynamical effects from

the outer-loop ones, we first begin with an assimilation example without the outer loop. Then the outer loop is added in a second example. Both examples use the previously described experiment framework. They are based on the assimilation of a single observation localized at the end of a 3-h assimilation window. The observation is realized at the longitude 164.2° .

1) ASSIMILATION WITHOUT THE OUTER LOOP

As we only have a single observation, the 3D-FGAT increment distribution has a Gaussian shape due to the correlations of the background errors. The consequence of Eq. (20) is a different location for the maxima of the 3D-FGAT and 4D-Var increments. Within 4D-Var, the adjoint model is used to compute the position of the

TABLE 1. Number of assimilated observations by the 3D-FGAT with the updated screening as a function of the iteration of the outer loop.

Loop No.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
	69	81	81	81	81	83	84	85	85	85

DECEMBER 2010

MASSART ET AL.

4517

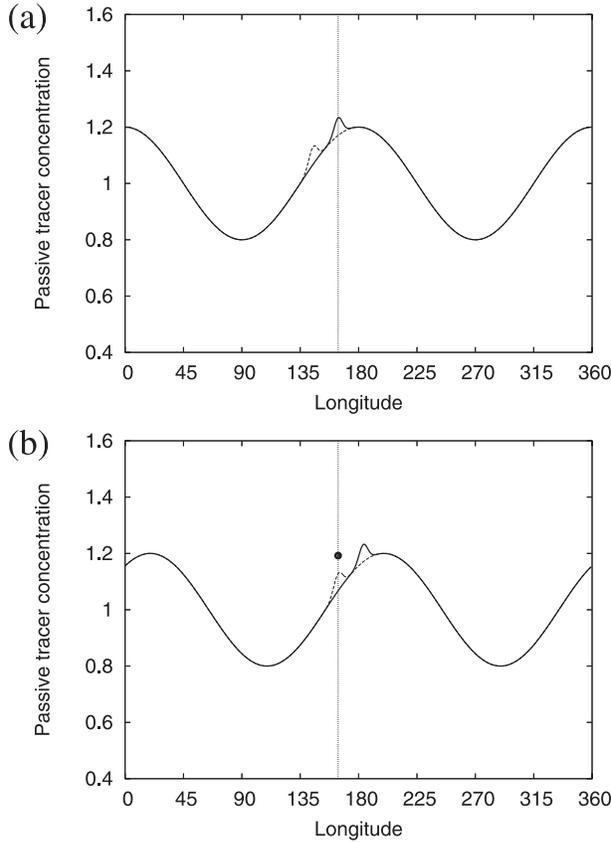


FIG. 4. Analyzed concentration of the passive tracer (a) at the initial time and (b) at the observation time, produced by the 3D-FGAT (solid line) and the 4D-Var (dotted line) methods, while assimilating one observation (circle) at the end of a 3-h assimilation window. The velocity is 200 m s^{-1} . The vertical dotted line represents the location of the observation.

correction at the initial time in order for it to be transported at the proper location at the observation time. The correction of the 3D-FGAT is instead added at the observation location at the initial time and is then advected getting beyond the observation location at the observation time. This shows the risk of using the 3D-FGAT method when the dynamics is rapid compared to the size of the assimilation window. It is illustrated in Fig. 4 where the velocity of the forcing field is set to 200 m s^{-1} . This excessive value of the velocity is not relevant for atmospheric winds, but this value was chosen in order to have a strong advection during the assimilation window. In 3 h, a fluid particle at 200 m s^{-1} covers 2160 km, which is more than 4 times the length scale of the correlation of the background errors. This means that the background field and the true state are shifted eastward by about 19.4° in 3 h.

To quantify the 3D-FGAT error, we compared it to the 4D-Var, computing the discrepancy \mathcal{D} between the

analyses produced by the two methods, respectively $\mathbf{x}_a^{\text{FGAT}}$ and $\mathbf{x}_a^{4\text{D}}$, by

$$\mathcal{D} = 100 \times \sqrt{\frac{\|\mathbf{x}_a^{\text{FGAT}} - \mathbf{x}_a^{4\text{D}}\|^2}{\|\mathbf{x}_a^{\text{FGAT}} - \mathbf{x}_b\|^2 + \|\mathbf{x}_a^{4\text{D}} - \mathbf{x}_b\|^2}}, \quad (23)$$

where $\|\cdot\|$ is the L_2 norm defined for a vector \mathbf{b} of dimension n by

$$\|\mathbf{b}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n b_i^2}. \quad (24)$$

The discrepancy \mathcal{D} is equal to 0% when the analyses are equal and is equal to 100% when the increments of the analyses are uncorrelated.

We evaluated the discrepancy \mathcal{D} as a function of the velocity. We let the velocity vary from 0.1 to 200 m s^{-1} . By modifying the velocity, we modify the model \mathbf{M} . To measure how far is the model from the 3D-FGAT assumption, we built the Frobenius (or Hilbert–Schmidt) norm $\|\cdot\|_F$ of $\mathbf{M} - \mathbf{I}$, where \mathbf{I} is the identity matrix. The Frobenius norm of the \mathbf{A} matrix of dimension n is defined by

$$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{i,j}^2}, \quad (25)$$

where $a_{i,j}$ is the element of \mathbf{A} on row i and column j . For the different values of the velocity, we computed the discrepancy \mathcal{D} between the 3D-FGAT and the 4D-Var analyses, as well as the norm $\mathcal{N} = \|\mathbf{M} - \mathbf{I}\|_F$. We found that the discrepancy \mathcal{D} is a linear function of the velocity and of the norm \mathcal{N} for low values of the velocity (Fig. 5). At 10 m s^{-1} , a fluid particle covers 108 km in 3 h, which is just more than the size of the grid cell of about 90 km. This means that the concentration in a grid cell weakly influences the concentration in this cell after 3 h. The diagonal of \mathbf{M} is thus close to zero. This explains why the norm \mathcal{N} becomes almost constant when the velocity reaches 20 m s^{-1} . At the same time, the discrepancy \mathcal{D} still grows with the velocity. For velocities of 50 and 200 m s^{-1} , as we use in this paper, the discrepancy \mathcal{D} is respectively 66% and close to 100%.

2) ASSIMILATION WITH THE OUTER LOOP

The problem posed by the 3D-FGAT method when the tangent linear of the propagation model is far from the identity matrix is amplified when an outer loop is used. As illustrated above, the 3D-FGAT increment at the observation time may be situated away from the observation location. This means that $\mathbf{HM}\mathbf{x}_a$ does not

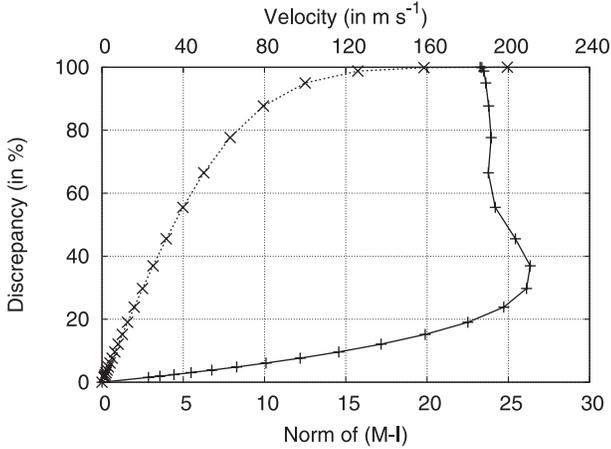


FIG. 5. Discrepancy \mathcal{D} (in %) between the 3D-FGAT and the 4D-Var analyses as a function of the Frobenius norm of $\mathbf{M} - \mathbf{I}$ (solid line) and as a function of the velocity (dotted line). See text for details.

differ much from $\mathbf{H}\mathbf{M}\mathbf{x}_b$. This case implies that the innovation vector of Eq. (12) for the second iteration of the outer loop is almost the same as in the first iteration. In the observation space, the effect of the first analysis is imperceptible. Assuming that $\mathbf{H}\mathbf{M}\mathbf{x}_a = \mathbf{H}\mathbf{M}\mathbf{x}_b$, Eq. (15) becomes

$$\mathbf{x}_a^n = \mathbf{x}_a^1 + \mathbf{K}^{\text{FGAT}} \mathbf{H}(\mathbf{x}_a^{n-1} - \mathbf{x}_b), \quad (26)$$

where \mathbf{x}_a^1 is the analysis obtained at the first iteration. As a consequence, each iteration will produce an increment of the same sign as the increment produced at the previous iteration. This increment is added to the previous one making the analysis differ more from the background (and from the first analysis) when the number of the iteration increases (Fig. 6a). It is possible to determine the convergence of the final increment (difference between the final analysis at the iteration n and the background). In the single observation example, the maximum of the total increment converges toward twice the value of the 4D-Var increment maximum for a velocity of 200 m s^{-1} (Table 2).

When the dynamics is less rapid, the propagation model is closer to the identity matrix but the behavior remains similar. When the discrepancy \mathcal{D} is lower than 100%, the 3D-FGAT increment propagated at the observation time is not null at the observation grid point. This makes the innovation vector change from one outer loop to another. Nevertheless, each iteration of the outer loop adds an artificial supplementary increment to the previous ones, as illustrated by Fig. 6b for a velocity of 50 m s^{-1} . The difference with high velocity values is the fact that the convergence of the total increment maximum is obtained for a lower value (Table 2).

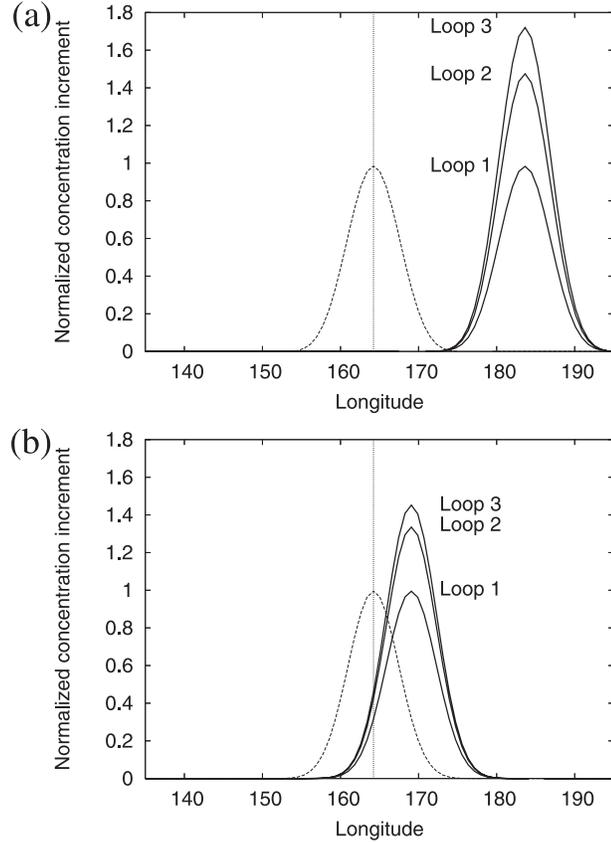


FIG. 6. Local zoom of the increment analysis at the observation time for three outer-loop iterations using the 4D-Var (dashed line) and the 3D-FGAT (solid lines) methods, while assimilating one observation measured at the end of a 3-h assimilation window, with an advection velocity of (a) 200 and (b) 50 m s^{-1} . The values are normalized by the maximum of the 4D-Var increment. The vertical dotted line represents the location of the observation.

4. Illustration on the earth sphere with a CTM

In the previous section, three particular behaviors of the 3D-FGAT using an outer loop were illustrated with a simple one-dimensional advection model. This section describes its behavior in a more complicated model, namely, a three-dimensional CTM. The first section presents the 3D-FGAT assimilation suite used to explore the behavior of the method. The following section describes the experiment conditions. The last section shows and discusses the results of the analysis in a region where the limitations of this 3D-FGAT variant are particularly evident.

a. The assimilation suite

The assimilation system used in this study is based on the European Centre for Research and Advanced Training in Scientific Computation (CERFACS) Valentina

TABLE 2. Value of the maximum of the 3D-FGAT increment for each iteration of the outer loop. The value is normalized by the maximum of the 4D-Var increment of the first outer loop. The assimilation experiments are the cases of one observation and a velocity V of 200 or 50 m s^{-1} .

Iteration	$V = 200 \text{ m s}^{-1}$	$V = 50 \text{ m s}^{-1}$
1	1.000	1.000
2	1.502	1.343
3	1.753	1.460
4	1.878	1.501
5	1.940	1.514
6	1.972	1.519
7	1.987	1.521
8	1.995	1.521
9	1.999	1.521
10	2.001	1.521

assimilation framework and the Météo-France comprehensive three-dimensional CTM Mocale. Valentina is an extension of the Mocale–Palm system (Massart et al. 2005) developed jointly by CERFACS and Météo-France in the framework of the FP5 European project Assimilation of *Envisat* Data (ASSET; Lahoz et al. 2007). It is based on the CERFACS Palm software (Buis et al. 2006) that allows it to be coupled with different CTMs. The flexibility offered by Palm makes Valentina a system that offers several assimilation options, like the choice of the variational method (3D-FGAT or 4D-Var), the choice of the representation for covariances of the background errors and the choice of the analyzed domain (regional or global).

The CTM Mocale covers the planetary boundary layer, the free troposphere, and the stratosphere. It provides a number of optional configurations with varying domain geometries and resolutions, as well as chemical and physical parameterization packages. Mocale is currently used for several applications, with recent examples in chemical weather forecasting (Dufour et al. 2004), chemistry–climate interactions (Teyssède et al. 2007), and intercontinental transport of ozone and of its precursors (Bousserez et al. 2007).

The first version of Valentina using Mocale, as it was originally implemented for the ASSET project, provided good quality ozone fields as compared with independent measurements with errors of the same order as those produced by several other assimilation systems (Geer et al. 2006). To improve the Valentina assimilation suite, several changes have been recently made in the characterization of the forecast errors (Massart et al. 2007; Pannekoucke and Massart 2008). To increase the consistency of the analysis, several diagnostics were added (Massart et al. 2009) as discussed by Desroziers et al. (2005). Recently, the outer loop has been implemented for the incremental methods.

b. Description of the experiment

In this study, we worked with a 2° by 2° global version of Mocale, with 60 vertical levels (from the surface up to 0.1 hPa). The meteorological forcing fields are provided by the operational ECMWF numerical weather prediction model. To compute the ozone fields, we adopted the linear ozone parameterization developed by Cariolle and Teyssède (2007) in its latest version. This parameterization is based on the linearization of ozone production–destruction rates using an altitude–latitude chemical model.

The forecast error covariance matrix of the Valentina assimilation suite is split into a correlation matrix and a diagonal matrix filled with the forecast error variances (square of the forecast error standard deviations). The correlation matrix is divided into a horizontal operator and a vertical operator. These operators are both modeled using a diffusion equation, which is a practical way to generate correlation shapes and in particular Gaussian shapes (Weaver and Courtier 2001). For this study, we generated only Gaussian correlations that can be characterized by their length scale. Horizontal correlations of the forecast errors are computed using a constant length scale of 220 km corresponding to a distance of 2° at the equator. Vertical correlations are computed using a constant length scale of 0.35 (in units of the logarithm of the pressure).

The assimilated data come from the Microwave Limb Sounder (MLS) instrument. This instrument has been flying onboard the *Aura* satellite in a sun-synchronous polar orbit since August 2004. Vertical profiles of several atmospheric parameters are retrieved from the millimeter and submillimeter thermal emission measured at the atmospheric limb (Waters et al. 2006). Measurements are performed between 82°S and 82°N , with a long-track resolution that varies from about 165 km to nearly 300 km. For our study we have used the latest version (v2.2) of the MLS ozone product (see Massart et al. 2009 for more details).

The experiment we carried out was a reanalysis of the global atmospheric ozone performed for the fall of 2007. The assimilation scheme used for this was the 3D-FGAT method with the increment applied at the beginning of 3-h windows and three outer-loop iterations.

c. Assimilation results

We present hereafter only the reanalysis results obtained for 27 August 2007 and for the assimilation window that spans from 0300 to 0600 UTC, when a particular behavior of the assimilation was encountered. We focus on the region 60° – 15°S , 100° – 10°W at the 10-hPa pressure level (which corresponds to an altitude of approximately 30 km). This region of interest is chosen because there is

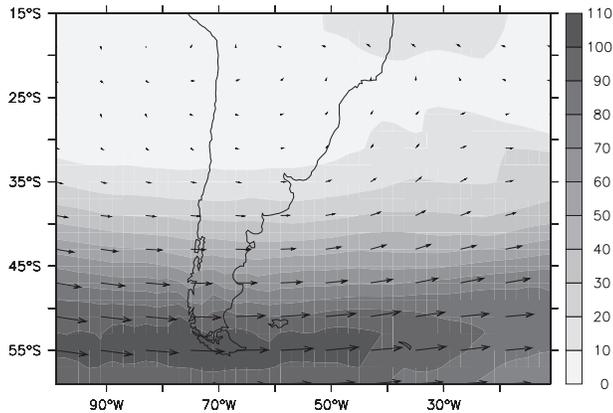


FIG. 7. Regional zoom of the wind amplitude (in m s^{-1}) at 10 hPa for 0300 UTC 27 Aug 2007. The arrows represent the wind direction.

an important gradient in the wind strength for the selected date, with values ranging from 0.6 to 107 m s^{-1} (Fig. 7). Moreover, during the assimilation window, the satellite flies across this region twice, once at the beginning of the window between 0300 and 0307 UTC, and then at the middle of the window between 0435 and 0446 UTC (Fig. 8).

As expected, the 3D-FGAT increments of the first outer-loop iteration are located around the observation location (Fig. 8a). Their spread is due to the correlation of the background errors. As described previously, these increments are added at the initial time of the assimilation window (0300 UTC) to the background state, in order to compute the first analysis. But, with a wind of about 100 m s^{-1} at 60°S , the increment is propagated eastward at approximately 540 km at 1.5 h later, when the second set of data is measured. At 60°S , the distance of 540 km represents a shift of about 10° in longitude. At 45°S , it represents a shift of about 7° . This means that at these latitudes, between 0435 and 0446 UTC, the background and the first analysis are similar at the observation location of the second set of observations. The innovation vector for the second iteration of the outer loop is computed using the first analysis as a first guess, as shown by Eq. (12). As a consequence, for the second set of observations (measured between 0435 and 0446 UTC), in the latitudes between 45° and 60°S , the innovation vector of the second iteration is the same as in the first iteration. This situation is similar to what we saw with the example on the circle when the value of the velocity was 200 m s^{-1} (Fig. 6a). The consequence is that the second iteration of the outer loop computes an increment in the region where the strength of the wind is important of the same order as at the first iteration (Fig. 8b). Where the strength of the wind is lesser, the increments brought by the second outer loop are negligible.

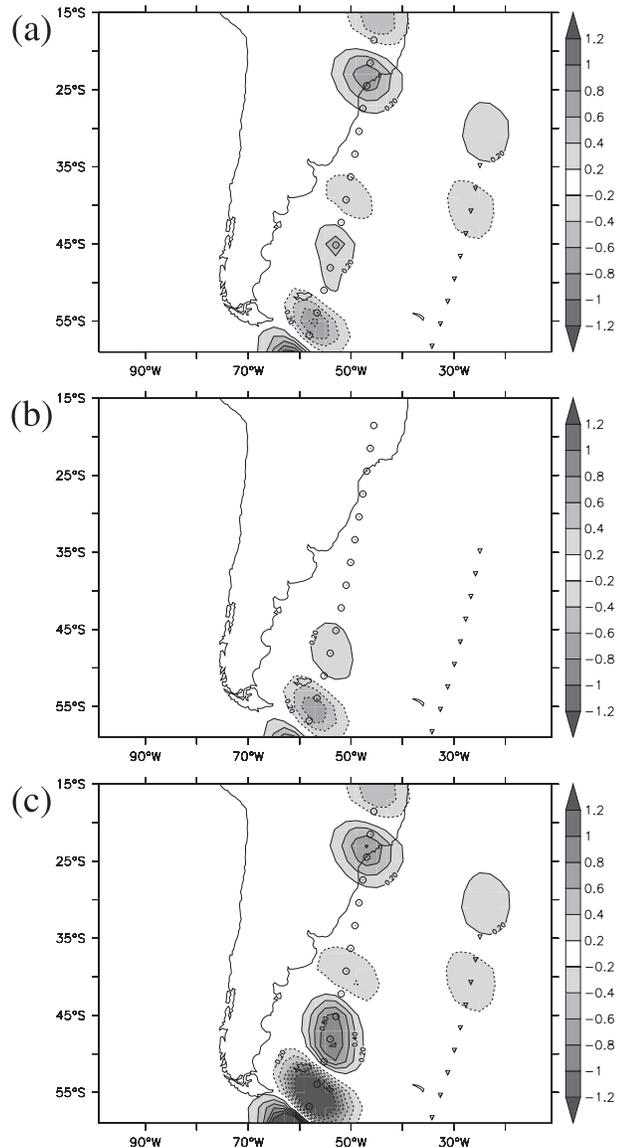


FIG. 8. Regional zoom of the ozone increment (in ppmv) at 10 hPa for 0300 UTC 27 Aug 2007: (a) for the first outer loop, (b) for the second outer loop, and (c) for the final analysis (sum of the increments of the three outer-loop iterations). The triangles represent the MLS data between 0300 and 0307 UTC. The circles represent the MLS data between 0435 and 0446 UTC.

Concerning the first set of observations, as it is measured at the beginning of the assimilation window, the propagation of the first analysis at the time of these observations is close to the identity matrix. The norm $\|\mathbf{M} - \mathbf{I}\|_F$ is low and the 3D-FGAT solution is close to the 4D-Var one. Thus, the analysis computed for the second iteration of the outer loop produces an increment with very small values.

The behavior of the third iteration of the outer loop is similar to the second one. At the latitudes where the

strength of the wind is important compared to the size of the assimilation window, the outer loop amplifies the increment. The consequence is an overestimation of the total correction applied to the ozone concentrations in these regions (Fig. 8c). Moreover, when the analyzed ozone field is compared to the observations (at the observation time), the assimilation process seems not to bring any improvement at these latitudes.

5. Conclusions

3D-FGAT is a useful alternative to 4D-Var as it allows both to avoid the development of the adjoint of the linearized forecast model and to gain computational time. A practical feature of 4D-Var is the outer loop. We investigated the impact of applying the outer loop with 3D-FGAT that does not use the adjoint of the linearized forward model and does not propagate the increment in time. This investigation required the development of a 3D-FGAT variant by imposing the analysis increment to the beginning of the assimilation window instead of at its middle as is usually done. This paper has thus presented the formulation of the 3D-FGAT variant using the outer loop.

To discuss the pros and the cons of this 3D-FGAT variant for atmospheric transport, twin experiments were performed with a forecast model that simulates the advection of a passive tracer on a circular domain. Two experiments showed the benefits of the outer loop. When the assimilation operators are nonlinear the outer loop allows us to update the linearization around a better state and thus increases the quality of the analysis. When a bias exists in the background state, pertinent observations may be rejected by the observation screening. The outer loop here allows us to inject these observations in the assimilated data by updating the observation screening with the first guess refreshed at each iteration. The addition of these observations also increases the quality of the analysis.

The limitations of the 3D-FGAT with the outer loop appear when the limitations of the classical 3D-FGAT appear. The absence of backward propagation in 3D-FGAT is one of the two sources of error when compared to the 4D-Var in terms of increments. In our one-dimensional advection study with a constant velocity and a homogeneous covariance matrix of the background errors, it is the only source of error. We showed through the discrepancy \mathcal{D} that errors grow as a function of the velocity. With another twin experiment, we pointed out that when the velocity is too large in the advection case, as illustrated even with a value of 50 m s^{-1} on the earth's great circle, the 3D-FGAT variant increases the increment at each iteration of the outer loop and finally overestimates the amplitude of the correction. We also

found this overestimation in the real ozone assimilation experiment with a CTM. The combination of 3D-FGAT and the outer loop must therefore be carefully used, especially when the dynamics of the studied phenomenon is rapid compared to the size of the assimilation window.

Acknowledgments. The development of the Valentina assimilation suite has benefited from the support of the Ether Centre for Atmospheric Chemistry Products and Services (see online at <http://munk.ipsl.jussieu.fr/>) and the French ADOMOCA project within the LEFE programs (see online at <http://www.insu.cnrs.fr/co/lefe>).

APPENDIX

The Forecast Model and Its Properties

The forecast model used in the one-dimensional study (section 3) simulates the evolution of the concentration of a passive tracer along the one-dimensional axis, based on Eq. (17). The corresponding adjoint equation is

$$\frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial t} - \mathbf{u}(\eta) \frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial \eta} = 0, \quad (\text{A1})$$

where \mathbf{x}^* is the dual of \mathbf{x} . This shows that the adjoint of the transport equation is the transport applied in the backward direction (i.e., with the opposite velocity).

In the particular case of an advection with a constant velocity u on the circular domain, the solution of the forecast model is $\mathbf{x}(\eta, t) = \mathbf{x}(\eta - ut, 0)$. The model can thus be considered as a simple translation τ_ϕ of phase $\phi = ut$, $(\tau_\phi \cdot \mathbf{x})(\eta) = \mathbf{x}(\eta - \phi)$. Applying the Fourier transform, we have for the wavenumber n , $(\tau_\phi \cdot \mathbf{x})_n = e^{-in\omega\phi} x_n$, where x_n is the Fourier coefficient at the wavenumber n and $\omega = 2\pi/L$ with L as the perimeter of the circle. This makes $e^{-in\omega\phi}$ an eigenvalue of the translation operator. By the eigendecomposition of τ_ϕ , it can be shown that τ_ϕ^* has the same eigenvalues as τ_ϕ^{-1} , the complex conjugate of $e^{-in\omega\phi}$ (required to compute τ_ϕ^*) being also its inverse (i.e., $e^{in\omega\phi}$). As they share the same eigenvectors and eigenvalues, $\tau_\phi^* = \tau_\phi^{-1}$. Hence, if \mathbf{M} denotes the matrix associated to the linear transport equation (i.e., a translation in our case) and if \mathbf{M}^* denotes the matrix associated to its adjoint, then $\mathbf{M}^* = \mathbf{M}^{-1}$. Being in the Cartesian space with the usual scalar product, the matrix associated to the adjoint equation is the transpose of the matrix associated to the direct equation, $\mathbf{M}^* = \mathbf{M}^T$, which implies

$$\mathbf{M}^T = \mathbf{M}^{-1}. \quad (\text{A2})$$

Moreover, if \mathbf{B} is a homogeneous covariance matrix on the circle, then according to the Wiener Khinchin

theorem, its principal axes are the Fourier modes so that \mathbf{B} is a diagonal in Fourier space (Mallat 2009). Since the translation is also a diagonal operator in Fourier space, \mathbf{B} and \mathbf{M} commute, leading to $\mathbf{MB} = \mathbf{BM}$. By using Eq. (A2), it brings

$$\mathbf{MBM}^T = \mathbf{B}. \quad (\text{A3})$$

The two properties of Eqs. (A2) and (A3) remain true in the discretized case if the model is expressed as a translation operator. This is the way we choose to model the pure advection equation.

REFERENCES

- Bennett, A. F., 2002: *Inverse Modelling of the Ocean and Atmosphere*. Cambridge University Press, 260 pp.
- Bloom, S. C., L. L. Takacs, A. M. Da Silva, and D. Ledvina, 1996: Data assimilation using incremental analysis updates. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 1256–1271.
- Bousserez, N., and Coauthors, 2007: Evaluation of the MOCAGE chemistry transport model during the ICARTT/ITOP experiment. *J. Geophys. Res.*, **112**, D10S42, doi:10.1029/2006JD007595.
- Buis, S., A. Piacentini, and D. Déclat, 2006: PALM: A computational framework for assembling high performance computing applications. *Concurr. Comput.*, **18**, 247–262.
- Cariolle, D., and H. Teyssède, 2007: A revised linear ozone photochemistry parameterization for use in transport and general circulation models: Multi-annual simulations. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 2183–2196.
- Courtier, P., and O. Talagrand, 1987: Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. II: Numerical results. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **113**, 1329–1347.
- , J.-N. Thépaut, and A. Hollingsworth, 1994: A strategy for operational implementation of 4D-var, using an incremental approach. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **120**, 1367–1387.
- , and Coauthors, 1998: The ECMWF implementation of three-dimensional variational assimilation (3D-Var). I: Formulation. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **124**, 1783–1807.
- Desroziers, G., L. Berre, B. Chapnik, and P. Poli, 2005: Diagnosis of observation, background and analysis-error statistics in observation space. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **131**, 3385–3396.
- Dufour, A., M. Amodei, G. Ancellet, and V.-H. Peuch, 2004: Observed and modelled “chemical weather” during ESCOMPTE. *Atmos. Res.*, **74**, 161–189.
- Elbern, H., H. Schmidt, and A. Ebel, 1997: Variational data assimilation for tropospheric chemistry modeling. *J. Geophys. Res.*, **102**, 15 967–15 985.
- Fillion, L., H. L. Mitchell, H. R. Ritchie, and A. N. Staniforth, 1995: The impact of a digital filter finalization technique in a global data assimilation system. *Tellus*, **47A**, 304–323.
- Fisher, M., and D. J. Lary, 1995: Lagrangian 4-dimensional variational data assimilation of chemical-species. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **121**, 1681–1704.
- , and E. Andersson, 2001: Developments in 4D-Var and Kalman filtering. Tech. Memo. 347, ECMWF, 36 pp.
- Gandin, L. S., 1963: *Objective Analysis of Meteorological Fields*. Israel Program for Scientific Translation, 242 pp.
- Gauthier, P., and J.-N. Thépaut, 2001: Impact of the digital filter as a weak constraint in the preoperational 4DVAR assimilation system of Météo-France. *Mon. Wea. Rev.*, **129**, 2089–2102.
- , M. Tanguay, S. Laroche, S. Pellerin, and J. Morneau, 2007: Extension of 3DVAR to 4DVAR: Implementation of 4DVAR at the Meteorological Service of Canada. *Mon. Wea. Rev.*, **135**, 2339–2354.
- Geer, A., and Coauthors, 2006: The ASSET intercomparison of ozone analyses: Method and first results. *Atmos. Chem. Phys.*, **6**, 5445–5474.
- Kalman, R. E., 1960: A new approach to linear filtering and prediction problems. *J. Basic Eng.*, **82**, 35–45.
- Lahoz, W. A., and Coauthors, 2007: The assimilation of Envisat data (ASSET) project. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 1773–1796.
- Laroche, S., P. Gauthier, M. Tanguay, S. Pellerin, and J. Morneau, 2007: Impact of the different components of 4DVAR on the global forecast system of the Meteorological Service of Canada. *Mon. Wea. Rev.*, **135**, 2355–2364.
- Lorenc, A. C., 1986: Analysis methods for numerical weather prediction. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **112**, 1177–1194.
- , and F. Rawlins, 2005: Why does 4D-Var beat 3D-Var? *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **131**, 3247–3257.
- Mallat, S., 2009: *A Wavelet Tour of Signal Processing: The Sparse Way*. 3rd ed. Vol. 1, Academic Press, 832 pp.
- Massart, S., D. Cariolle, and V.-H. Peuch, 2005: Vers une meilleure représentation de la distribution et de la variabilité de l’ozone atmosphérique par l’assimilation des données satellitaires. *C. R. Geosci.*, **337**, 1305–1310.
- , A. Piacentini, D. Cariolle, L. El Amraoui, and N. Semane, 2007: Assessment of the quality of the ozone measurements from the Odin/SMR instrument using data assimilation. *Can. J. Phys.*, **85**, 1209–1223.
- , C. Clerbaux, D. Cariolle, A. Piacentini, S. Turquety, and J. Hadji-Lazaro, 2009: First steps towards the assimilation of IASI ozone data into the MOCAGE-PALM system. *Atmos. Chem. Phys.*, **9**, 5073–5091.
- Maybeck, P. S., 1979: *Stochastic Models, Estimation, and Control*. Vol. 1. Academic Press, 423 pp.
- Pannekoucke, O., and S. Massart, 2008: Estimation of the local diffusion tensor and normalization for heterogeneous correlation modelling using a diffusion equation. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **134**, 1425–1438.
- Sasaki, Y. K., 1958: An objective analysis based on the variational method. *J. Meteor. Soc. Japan*, **36**, 77–88.
- , 1970: Some basic formalisms in numerical variational analysis. *Mon. Wea. Rev.*, **98**, 875–883.
- Talagrand, O., 1997: Assimilation of observations: An introduction. *J. Meteor. Soc. Japan*, **75** (1B), 191–209.
- , and P. Courtier, 1987: Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. I: Theory. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **113**, 1311–1328.
- Teyssède, H., and Coauthors, 2007: A new tropospheric and stratospheric chemistry and transport model MOCAGE-Climat for multi-year studies: Evaluation of the present-day climatology and sensitivity to surface processes. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 5815–5860.
- Thacker, W., and R. B. Long, 1988: Fitting dynamics to data. *J. Geophys. Res.*, **93**, 1227–1240.
- Tremolet, Y., 2004: Diagnostics of linear and incremental approximations in 4D-Var. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **130**, 2233–2251.
- Waters, J. W., and Coauthors, 2006: The Earth Observing System Microwave Limb Sounder (EOS MLS) on the Aura satellite. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, **44**, 1075–1092.
- Weaver, A., and P. Courtier, 2001: Correlation modelling on the sphere using a generalized diffusion equation. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **127**, 1815–1846.

3.2.3 Conclusions

Dans cette publication, nous avons étudié en détail l'impact de l'application de la boucle externe au 3D-FGAT. Avec cette méthode variationnelle, l'incrément d'analyse est habituellement introduit en milieu de fenêtre d'assimilation. Mais, comme pour l'étude préliminaire de la section 3.1, l'utilisation de la boucle externe impose ici de l'introduire en début de fenêtre d'assimilation.

Afin d'examiner les avantages et les inconvénients de cette variante du 3D-FGAT pour le transport atmosphérique, des expériences jumelles sont menées à l'aide d'un modèle de prévision qui simule l'advection d'un traceur passif sur un domaine circulaire. Deux expériences ont montré les bénéfices de la boucle externe. Lorsque les opérateurs d'assimilation sont non-linéaires, la boucle externe permet de les relinéariser autour d'une nouvelle condition initiale de meilleure qualité. Aussi, lorsqu'un biais existe dans l'ébauche, des observations pertinentes peuvent être rejetées avec l'utilisation d'un critère de sélection, et la boucle externe permet alors de les injecter dans les données assimilées en repropageant le *guess* à chaque itération.

Les limitations du 3D-FGAT avec boucle externe sont en fait les mêmes que celles du 3D-FGAT classique mais elles sont exacerbées. Dans notre cas d'étude d'advection uni-dimensionnelle avec vitesse constante et matrice homogène de covariance d'erreur d'ébauche, l'absence de rétro-propagation est alors la seule source d'erreur. Nous avons ainsi montré que l'erreur augmente en fonction de la vitesse. Dans une dernière expérience théorique, nous remarquons que lorsque la vitesse est trop importante, ce qui est illustré avec une valeur de 50 m.s^{-1} sur le cercle équatorial, notre variante du 3D-FGAT augmente l'incrément à chaque itération de la boucle externe et finit par surestimer l'amplitude de la correction.

Nous avons retrouvé cette surestimation de l'incrément d'analyse dans une véritable expérience d'assimilation de données d'ozone provenant d'*Aura*/MLS avec le MCT MOCAGE. En conclusion, la combinaison du 3D-FGAT et de la boucle externe doit être utilisée avec prudence, particulièrement lorsque la dynamique des phénomènes étudiés est rapide comparée à la taille de la fenêtre d'assimilation.

3.3 Conséquence : l'adoption du 4D-Var

Comme nous venons de le voir, la combinaison du 3D-FGAT avec la boucle externe doit être utilisée avec prudence si l'on désire obtenir des analyses de qualité. Nous souhaitons réaliser des expériences pour lesquelles le transport des espèces est très rapide. En conservant des fenêtres d'assimilation de même durée dans ce cas, la combinaison du 3D-FGAT et de la boucle externe ne conserve plus que deux avantages : une meilleure sélection des observations à chaque itération de la boucle externe d'une part, et la possibilité de changer la résolution du modèle d'une itération de la boucle externe à l'autre d'autre part. Notre seule possibilité pour obtenir des analyses de qualité serait de réduire la taille des fenêtres d'assimilation, par exemple à une durée d'une heure. Dans un tel cas, le nombre de processus d'analyse est multiplié par trois, ce qui nous éloigne fortement de notre souhait de réaliser une assimilation de données haute résolution conservant un coût raisonnable.

Pour pallier totalement le problème rencontré avec le 3D-FGAT, la meilleure solution est encore d'utiliser la méthode variationnelle 4D-Var. Et pour conserver un coût le plus réduit possible, nous avons donc développé le 4D-Var en terme d'incrément, en implémentant dans un premier temps le modèle linéaire et son adjoint pour la dynamique. La dynamique étant dorénavant considérée lors du processus de minimisation, nous pouvons utiliser des fenêtres d'assimilation de 12 heures afin de diminuer le nombre d'itérations de l'analyse. Dans la suite,

nous travaillons avec cette méthode.

Dans le futur, nous prévoyons d'utiliser la boucle externe avec la méthode 4D-Var incrémentale pour laquelle elle a été initialement conçue. À ce propos, on trouvera dans LAROCHE *et al.* [57] une estimation quantifiée de l'apport des méthodes 3D-FGAT, 4D-Var et 4D-Var avec boucle externe par rapport à la méthode 3D-Var pour le système de prévisions global des services météorologiques du Canada. Nous envisageons aussi d'introduire la chimie dans le modèle linéaire et son adjoint, ce qui devrait améliorer la qualité de l'assimilation de données.

Quatrième partie

Assimilation de données haute résolution

Nous venons de voir dans la partie précédente quelles expériences et quels choix nous ont amené à nous tourner vers la méthode variationnelle 4D-Var incrémentale. Nous avons décrit cette méthode à la page 54 de la partie II concernant les méthodes variationnelles utiles dans ce travail de thèse. Son fonctionnement, que nous avons évalué par comparaison à des résultats obtenus avec la méthode 3D-FGAT, s'est montré satisfaisant et les analyses sont améliorées dans les zones où le transport est très rapide. Dans cette partie, nous cherchons à adapter l'assimilation de données afin d'exploiter de manière optimale l'information provenant des instruments embarqués à bord des satellites de dernière génération. De leur qualité et de l'exploitation de leurs caractéristiques dépend bien évidemment la qualité de l'assimilation de données. Dans cette partie, nous résumons le travail présenté dans un article en cours de soumission au journal *Atmospheric Chemistry and Physics*, reproduit dans la suite.

Nous choisissons d'assimiler les données provenant de l'instrument de dernière génération **IASI** car il possède une **haute répartition spatiale**. Ses caractéristiques ont été introduites dans la partie I (page 37). Rappelons tout de même que la taille des empreintes de l'interféromètre IASI est de 12 km de diamètre et que cette taille est bien inférieure à celle de la résolution horizontale couramment utilisée dans les MCT en version globale dans le cadre de l'assimilation de données. Des exemples de résolutions horizontales globales actuellement utilisées dans les MCT ont été fournis précédemment dans l'introduction de la partie III (page 77). Par exemple, pour la plupart des applications récentes de Mocage, les grilles horizontales globales utilisées sont la grille Gaussienne T42 ou la grille régulière 2° par 2° (correspondant respectivement à des cellules d'environ 310×310 km² ou 220×220 km² à l'équateur).

Afin de réduire la perte d'informations lors de la création des super-observations IASI, nous avons donc développé une version globale haute résolution de Mocage. Nos capacités de calcul informatique nous imposent de nous limiter à une **grille T170** (correspondant à des cellules d'environ 78×78 km² à l'équateur). De plus, la prise en compte des AK de IASI est très coûteuse. À sa place, nous avons combiné les données de MLS (décrites dans la partie I à la page 37) à celles de IASI car les observations MLS permettent de contraindre la répartition verticale de l'information dans la stratosphère et la haute troposphère à un faible coût. Deux jeux de super-observations d'ozone ont ainsi été générés en moyennant les données IASI sur les grilles T42 et T170 et les combinant aux données MLS. Nous appelons respectivement IASI T42 & MLS et IASI T170 & MLS ces deux jeux de super-observations.

Nous avons examiné la période du mois de septembre 2008 qui correspond à la nuit polaire au-dessus du pôle sud et à l'arrivée progressive de la lumière du soleil vers les hautes latitudes. Le trou d'ozone antarctique se forme avec de forts gradients de concentration à sa frontière et des structures filamenteuses d'ozone s'extraient du bord associé au vortex polaire. Pour notre étude, j'ai dans un premier temps produit des champs d'ozone avec des simulations directes (sans assimilation) du modèle Mocage aux résolutions horizontales T42 et T170. Nous appelons MI et Mh ces expériences, où la première lettre signifie Mocage et la seconde faible (*low*) ou haute (*high*) résolution horizontale du modèle. Ces simulations nous permettent d'évaluer l'impact du changement de résolution horizontale du modèle sans assimilation de données et elles fournissent une référence pour évaluer l'impact de l'assimilation. Dans un second temps, j'ai assimilé le jeu de super-observations IASI T42 & MLS avec les deux versions de Mocage et le jeu de super-observations IASI T170 & MLS avec Mocage sur grille T170. Nous appelons All, Ahl

Nom de l'exp.	Rés. hor. du modèle	Données assim.	Long. de portée de la corr. hor.
Ml	T42	sans	sans
Mh	T170	sans	sans
All	T42	T42 IASI & MLS	2.5°
Ahl	T170	T42 IASI & MLS	2.5°
Ahh	T170	T170 IASI & MLS	0.7°

Tab. IV.0.1 : *Description des expériences.*

et Ahh ces expériences, où la première lettre signifie Assimilation, la seconde faible ou haute résolution horizontale du modèle et la troisième faible ou haute répartition spatiale du jeu de super-observations assimilées. La comparaison entre les expériences All et Ahl est utilisée pour étudier l'impact sur les analyses de l'utilisation d'un MCT à haute résolution, alors que la comparaison entre Ahl et Ahh fournit des informations sur l'impact de l'augmentation de la résolution horizontale des données. Ces cinq expériences sont récapitulées dans le tableau IV.0.1 en fonction de la résolution horizontale de Morage, du jeu de données assimilées et de la longueur de portée de la corrélation horizontale.

Les simulations directes Ml et Mh montrent que l'augmentation de la résolution horizontale modifie non seulement les structures d'ozone de petite échelle mais aussi celles de grande échelle. De plus, la résolution horizontale peut modifier de plus de 1 mPa les concentrations d'ozone, principalement dans l'UTLS, et de plus de 5 % les colonnes totales d'ozone, principalement dans les régions polaires. Nous avons mis cette modification en lien avec une meilleure représentation de la dynamique verticale des forçages dans la configuration T170.

Pour nos trois expériences d'assimilation All, Ahl et Ahh avec le système Valentina, le problème d'assimilation de données est toujours résolu dans l'espace spectral (*c.f.* page 85 section 1.3 de la partie III) afin de réduire le coût numérique de l'assimilation. La comparaison entre All et Ahl montre une influence globalement positive, mais faible, sur les analyses d'ozone de l'augmentation de la résolution horizontale du MCT. Les différences en termes de colonnes totales d'ozone entre All et Ahl, comparées aux réanalyses ERA-Interim ou aux données OMI, sont très petites. Néanmoins, l'augmentation de la résolution apporte un meilleur accord avec les concentrations d'ozone de ERA-Interim en terme de variabilité. Les champs d'ozone issus des analyses ont aussi été comparés à des sondes d'ozone et ceux de l'assimilation Ahl sont légèrement meilleurs. Cependant, ils sont dégradés à certains niveaux verticaux. Ce dernier résultat est mis en lien avec le manque d'information sur notre utilisation des données IASI T42 assimilées pour contraindre l'analyse du profil vertical, en particulier dans la haute troposphère. Cela devrait être amélioré par l'utilisation des AK de IASI.

La comparaison des expériences Ahl et Ahh montre que le changement de résolution horizontale dans le jeu de super-observations assimilées améliore la variabilité des colonnes totales d'ozone comparée aux réanalyses ERA-Interim et aux données OMI dans la bande de latitude [90° S : 60° S]. Afin de représenter les structures de petite échelle présentes dans les observations, la longueur de portée de la corrélation horizontale de l'erreur d'ébauche a dû être adaptée. Mais ce changement de longueur de portée réduit l'influence des données MLS par rapport aux données nouvelles et plus fines IASI T170 et **l'information provenant des données IASI T170 n'est plus suffisamment contrainte sur la verticale**. Il en résulte notamment une dégradation de l'accord des analyses avec les sondes d'ozone à certains niveaux verticaux. De plus, le gradient horizontal des concentrations d'ozone à la frontière du vortex polaire au niveau

de pression 55 hPa est plus lisse que celui des réanalyses ERA-Interim ou des analyses Ahl. La différence zonale entre les pressions partielles d'ozone issues de Ahl et celles issues de Ahh montre de grandes différences dans les champs d'ozone qui ne sont pas confinées au niveau de pression 55 hPa mais s'étendent sur la moyenne stratosphère. Ce résultat met en avant le besoin d'avoir une source d'information sur la distribution verticale de l'ozone aussi dense que le jeu de données de colonnes totales assimilées.

Dans notre configuration, les données MLS sont donc trop éparses par rapport aux données IASI. Et dans le futur, l'utilisation des AK de IASI semble inévitable. Pour améliorer encore l'assimilation, on peut aussi songer à l'utilisation de longueurs de portée horizontales anisotropes et inhomogènes afin de mieux extraire l'information haute résolution contenue dans les observations. Enfin, nous avons concentré notre analyse sur une période de temps limité. Il est souhaitable d'étendre la période de l'étude, notamment afin de vérifier la validité de nos conclusions à d'autres saisons et aussi pour caractériser la variabilité interannuelle de la qualité de nos analyses.

1

Article soumis au journal *Atm. Che.*
Phy.

Le travail que nous venons de décrire a donné lieu à l'écriture d'un article soumis au journal *Atmospheric Chemistry and Physics*. Cet article est reproduit dans les pages suivantes.

Manuscript prepared for *Atmos. Chem. Phys.*
with version 2.3 of the L^AT_EX class copernicus.cls.
Date: 4 October 2011

High resolution assimilation of IASI ozone data with a global CTM

B. Pajot¹, S. Massart¹, D. Cariolle^{1,6}, A. Piacentini¹, O. Pannekoucke², W. A. Lahoz³, C. Clerbaux^{4,5}, P. F. Coheur⁵,
and D. Hurtmans⁵

¹CERFACS/SUC CNRS-URA 1875, AE team, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse, France

²CNRM/GAME, Météo-France/CNRS-URA 1357, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse, France

³NILU, Post Box 100, 2027 Kjeller, Norway

⁴UPMC Univ. Paris 6; Université Versailles St.-Quentin; CNRS/INSU, LATMOS-IPSL, Paris, France

⁵Spectroscopie de l'Atmosphère, Chimie Quantique et Photophysique, Université Libre de Bruxelles, Brussels, Belgium

⁶Météo-France, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse, France

Abstract. The pixel size of the Infrared Atmospheric Sounding Interferometer (IASI) remote sensor is much smaller than the horizontal grid size of current Chemical Transport Models (CTMs). In order to assimilate the maximum of information from the IASI retrievals, we have increased the horizontal resolution of our model MOCAGE to be consistent with the IASI pixel size. Experiments are carried out with the Valentina data assimilation system using the standard and the high resolution versions of the model. Two resolutions of the horizontal Gaussian grid have been used for the model: with a T42 and a T170 triangular truncations. Our study is based on the combination of data from the IASI instrument and from the Microwave Limb Sounder (MLS), since this latter dataset allows the information to be spread through the whole atmospheric columns at a low computational cost. Two datasets of ozone super-observations have been constructed by averaging the IASI data on the two model grids.

Direct model simulations without data assimilation first show that the increase of the horizontal resolution modifies the ozone smallest scale structures as well as the ozone meridional distribution. This modification results from a better representation of the vertical velocity with the T170 configuration. When the ozone assimilation is performed there is less influence of the horizontal resolution of the model. Nevertheless, in a general way, comparisons with independent data show large reductions of the ozone standard deviations when the resolution is increased. When the ozone assimilation is performed with the high resolution dataset, the high resolution model does not improve the ozone analysis compared to the one obtained with the same model resolution but with the low resolution IASI dataset. This result is due to the difficulty to combine IASI data and MLS data. For assimilating IASI data at high resolution the horizontal correlation length-scale has to be decreased to catch the small scale structures present in the dataset. By doing so the influ-

ence of the coarser resolution MLS data is decreased and part of the information brought on the vertical shape of the ozone profile is lost. It is concluded that it is essential to add information on the vertical distribution of ozone column when the IASI data is assimilated at a resolution close to the pixel size. Using IASI averaging kernels would likely improve the simulations, but the computational cost would be much higher. Alternatively, better results might be obtained by a careful tuning of the horizontal correlation length-scale.

1 Introduction

Present day data assimilation systems for atmospheric chemistry are robust, efficient and are used for either scientific investigations or operational monitoring of the chemical composition of the atmosphere (Lahoz et al., 2007). Chemical data assimilation experiments for climate studies are usually built on top of General Circulation Models (GCMs) that often use simplified chemistry schemes. But for data assimilation experiments that aim to study the distribution of atmospheric species whose chemistry and transport time scales are of the same order of magnitude, Chemical Transport Models (CTMs) are widely used. For instance, operational chemical forecasts based on an analysis from an operational data assimilation suite that use CTMs are developed at the Belgian Institute for Space Aeronomy (BIRA), the Royal Netherlands Meteorological Institute (KNMI) and the National Aeronautics and Space Administration (NASA).

The global CTMs used for data assimilation by these centres have rather coarse horizontal resolutions, with grid size generally higher than 2°. As an example, the Belgian Assimilation System for Chemical Observations (BASCOE) from BIRA has a horizontal resolution of 3.75°×5° (Errera et al., 2008) or 2.5°×3.75° (Lahoz et al., 2011). The TM5 model from KNMI has a global horizontal resolution of 4°×6° or 2°×3° (Huijnen et al., 2010). Notably the 30-year reanalysis

of total ozone made at KNMI is on a grid of $2^\circ \times 3^\circ$ (van der A et al., 2010). And the Global Modeling Initiative (GMI) model of NASA has been used for stratospheric modelling with a horizontal resolution of $4^\circ \times 5^\circ$ (Rotman et al., 2001) and for combined stratospheric-tropospheric modelling with a horizontal resolution of $2^\circ \times 2.5^\circ$ (Allen et al., 2010).

These usual model resolutions are much coarser than the pixel size of new generation on-board instruments such as: a $13 \times 24 \text{ km}^2$ footprint (that corresponds to $0.12^\circ \times 0.22^\circ$ at the equator) for the Ozone Monitoring Instrument (OMI, Levelt et al. (2006)) or a 12 km footprint (that corresponds to 0.11° at the equator) for the Infrared Atmospheric Sounding Interferometer (IASI, Clerbaux et al. (2009)). One method widely applied to assimilate such data consists in an appropriate averaging of all the data measured within a model cell for a given time frame. The process is known as the creation of super-observations (Lorenc, 1981).

The average resulting from the creation of super-observations generates a loss of information. This may for example smooth the gradients or prevent the representation of local phenomena. Increasing the model resolution to the observational resolution is not always possible due to computational limitations in terms of time and memory. However a model resolution increase is required to use super-observations close to the datasets resolution and thus to better take into account the small scale information available in the dataset. The focus of this paper is to measure the expected improvements brought by the use of a global chemical data assimilation performed at a higher resolution than the usual ones. By higher resolution we mean both a higher resolution of the CTM horizontal resolution and consistent high-resolution super-observations that have to be assimilated.

The first dataset used for our assimilation is the ozone profiles from the Microwave Limb Sounder (MLS, Froidevaux et al. (2008); Livesey et al. (2008)). The MLS data allows the constraint of the vertical repartition of the ozone in the stratosphere and the upper troposphere. But the pixel size of MLS is about 1.5° that is comparable to the CTMs usual low resolution. The second dataset used, the IASI total ozone columns, has a much better horizontal resolution but brings little information on the vertical ozone distribution. The two datasets are complementary.

To evaluate the influence of the model horizontal resolution, the assimilation experiments have been carried out with the MOdèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle (MOCAGE) developed at Centre National de Recherches Météorologiques (CNRM) of Météo-France. MOCAGE has been used at two horizontal resolutions: a so-called T42 low resolution (corresponding approximately to $2.8^\circ \times 2.8^\circ$ with 64 by 128 Gaussian grid cells) and a high resolution one, so-called T170 (corresponding approximately to $0.7^\circ \times 0.7^\circ$ with 256 by 512 Gaussian grid cells). To be consistent with these model resolutions, two datasets of IASI ozone total columns super-observations, combined with MLS ozone profiles, are built for the assimilation: the IASI dataset is aver-

aged on the T42 (T170) low (high) resolution grid, what we simply call T42 (T170) IASI & MLS dataset.

The assimilation experiments are performed with the Valentina data assimilation system developed at the Centre Européen de Recherche et Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS). We investigate the period of the month of September 2008. Over the South Pole (SP), it is the end of the polar night and the sunlight is progressing towards the high latitudes. This period sees the formation of the Antarctic ozone hole with large ozone gradients at its boundary and filamentous structures extracted at the edge of the associated polar vortex. A situation that is particularly interesting to study the quality of a global ozone analyses.

The present paper is structured as follows. The next section details the characteristics of the ozone data used in this study. Section 3 describes the methodology used to produce the analyses. In section 4 the model simulations are discussed with emphasis on the impact of the horizontal resolution. The model simulations without assimilation are first analysed, followed by comparisons of the analyses to independent datasets: in situ and satellite measurements, and the ERA-interim ozone analyses produced by the European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF). Finally in section 5 we assess the ability of our model suite to assimilate the high resolution information from the IASI observations.

2 Ozone data

The assimilated ozone data from MetOp-A/IASI and the profiles from Aura/MLS are described below in section 2.1. The independent sources of information used for validation (section 2.2) come from the ozone reanalyses of the ECMWF, the total ozone columns of the OMI instrument and the ozone profiles of the ozonesondes.

2.1 Ozone observations for the assimilation

2.1.1 The IASI total ozone columns

The polar orbiting MetOp-A satellite carrying the IASI instrument on board was launched in October 2006. IASI measures the spectrum of infrared radiation (IR) emitted by the Earth-atmosphere system, from a low altitude sun-synchronous polar orbit, over a swath width of $\sim 2200 \text{ km}$, every 50 km at nadir (with 4 footprints of 12 km in diameter). The MetOp-A satellite takes about 100 min to complete one orbit, and therefore a complete mapping of the Earth is obtained in about 12 hours. IASI provides a good compromise between the meteorology requirements (high spatial coverage) and the atmospheric chemistry needs (accuracy for trace gases). In particular, essential chemical components like methane, carbon monoxide, ozone and other trace gases that play a key role in the atmospheric chemistry can be retrieved

Table 1. Number of super-observations from IASI and OMI total ozone columns, depending on the grid used for the averaging, and number of MLS ozone profiles, produced per day and per band of latitude (averaged for the month of September and rounded to the nearest decade).

Lat. bands	IASI		OMI		MLS
	T42	T170	T42	T170	
90° S : 60° S	7,760	33,510	4,540	27,990	420
60° S : 30° S	4,100	21,840	3,510	25,300	300
30° S : 30° N	6,190	41,600	4,930	38,000	530
30° N : 60° N	4,140	22,880	3,420	25,530	320
60° N : 90° N	7,620	30,700	8,150	61,980	450
global	28,370	148,420	24,250	176,290	2,020

from IASI measurements (Clerbaux et al. (2009); Clarisse et al. (2011)).

A fast retrieval approach named FORLI (Fast Operational/Optimal Retrieval on Layers for IASI) based on the optimal estimation theory has been used to provide the ozone global distribution profiles in near real time (Dufour et al. (2011); Scannell et al. (2011)). In this study we use the total ozone column products for cloud-free observations. For simplicity, the IASI ozone retrievals from FORLI are referred to as IASI data. These retrievals have a lower error and a better horizontal coverage than the ones assimilated in the previous study of Massart et al. (2009), in particular over the polar regions.

The averaging kernels (AKs) associated with the IASI retrievals are a product of FORLI along with the column contents. Unfortunately, due to computational limitations, this vertical distribution information had to be discarded in our system when working with a high resolution of the MOCAGE model. To be consistent in our assessment, we choose to neglect it also with a low resolution of the MOCAGE model. Alternatively, a constraint on the vertical ozone distribution over the stratosphere and the upper troposphere is ensured by the joint assimilation of Aura/MLS observed profiles.

For the period under study, there are 5 days (from September 16th to 20th) without IASI measurements due to MetOp-A calibration. Otherwise, an average of about 300 000 retrievals of total ozone column are produced per day. To assimilate these data into the T42 model and the T170 one, we build super-observations. They are obtained by the computation of the simple mean of all the observations made within a minute inside the same model cell. When the targeted grid is the T42 (T170) one, the obtained dataset is hereafter referred to as the T42 (T170) IASI data. This procedure reduces the daily number of observations as shown in Table 1.

2.1.2 The Aura/MLS ozone profiles

The MLS instrument has been flying onboard the Aura satellite in a sun-synchronous polar orbit since August 2004. We choose to assimilate the v2.2 version of MLS ozone product, notably because a detailed validation of this product and comparisons with other datasets already exist (Froidevaux et al. (2008), Livesey et al. (2008)). The latter works show in particular that in the middle stratosphere the MLS ozone data have small biases, with a random error of the order of 5%. MLS also measures constituents in the Upper Troposphere-Lower Stratosphere (UTLS) where retrievals are made at 4 levels, namely 215 hPa, 147 hPa, 100 hPa and 68 hPa. Nevertheless, the error is higher in this region with values in the range 5% to 100% below 100 hPa, from 2% to 30% at 100 hPa, while it is below 10% at lower pressure levels.

In previous studies we have assimilated the MLS data with a CTM at a $2^\circ \times 2^\circ$ resolution. Since this resolution is lower than the 1.5° distance of two successive MLS scans, we had to construct super-observations. The assimilation of the resulting super-observations set for the period studied in this paper was well characterized in Massart et al. (2011), so they are also used in the present study. For the period in consideration, it gives about 2 000 measurements at 16 pressure levels per day with a repartition by bands of latitude given in Table 1. During the period under study, there is no day without MLS measurements. A complete description of the Aura/MLS profiles and their usual treatments in the Valentina assimilation system can be found in Massart et al. (2011).

2.2 Ozone data for model validation

2.2.1 ERA-Interim reanalyses

ERA-Interim is a reanalysis of the global atmosphere covering the data-rich period from 1989 to the present, and continuing to present (Berrisford et al., 2009). The ERA-Interim project was initiated in 2006 to provide a bridge between ECMWF's previous reanalysis, ERA-40, and the next-generation extended reanalysis that has just begun at ECMWF. The ERA-Interim reanalysis was made to improve the quality of the stratospheric circulation compared to the ERA analysis. This is an important point for the present study. These data are known to be of good quality: they have been favourably compared with in situ measurements (Dragani, 2010a) and with satellite data (Dragani, 2010b).

The horizontal resolution of the reanalysis products of ERA-Interim is a N128 reduced Gaussian grid (512 longitude points and 256 latitude points), that corresponds to a spacing of about 0.7° (about 77 km at the equator). The atmosphere is divided into 60 vertical layers from the surface up to 0.1 hPa. The vertical resolution is finer in the planetary boundary layer and coarser in the stratosphere and mesosphere.

The ERA-Interim reanalysis system uses a 4-dimensional variational (4D-Var) analysis and a variational bias correction for satellite data. We have used the analyses produced at 00 and 12 UTC. For the period under study, the ozone data assimilated to produce the ERA-Interim data comes from the instruments MLS, OMI, SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CartograpHY (SCIAMACHY) and Solar Backscatter Ultraviolet (SBUV) with a total daily count of approximately 10^5 observations (Dee et al., 2011). As the MLS data are used to produce the ERA-Interim reanalysis and our ozone analysis, both datasets are not entirely independent and we expect in particular good consistency in their vertical distributions.

Since we perform assimilation experiments with the high T170 resolution of the model, the ERA-Interim reanalyses are interpolated from the N128 reduced Gaussian grid to the T170 Gaussian grid to make diagnostics. The differences between the ozone concentration from our experiments and the one from the ERA-Interim reanalyses are computed every 12 hours on the T170 grid on model levels and for the total ozone columns. From them monthly statistics are derived.

2.2.2 OMI-DOAS total ozone columns

On board the Aura satellite, OMI is a nadir viewing imaging spectrograph that measures the solar radiation backscattered by the Earth's atmosphere and surface (Levelt et al., 2006). OMI combines the advantages of European Space Agency (ESA) instruments Global Ozone Monitoring Experiment (GOME) and SCIAMACHY with the characteristics of the NASA's Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS) instrument. It measures the complete spectrum in the ultraviolet (UV) and visible wavelength range with a spatial resolution higher than its presursors and a daily global coverage. It is thus of particular interest to compare analyses made with the IASI IR data with these UV ones, since they are derived from different spectral bands of absorption.

In this study, we use the OMI total ozone columns data (available from <http://www.temis.nl>) produced with the KNMI DOAS method (Veefkind et al., 2006). The OMI total ozone columns have showed a globally averaged agreement better than 2% with the ground-based observations (Balis et al., 2007). The data show no significant dependence on latitude except for the high latitudes of the Southern Hemisphere (SH) where it systematically overestimates the total ozone value by 3% to 5%. In a manner consistent with the assimilated datasets, we average the measurements on each cell of the T170 grid. The daily number of resulting observations is given in Table 1 per bands of latitude. The resulting dataset is hereafter referred to as OMI data.

For each OMI measurement, the co-located (in space and time) model total column is computed using its nearest neighbours for the spatial interpolation and a linear time interpolation between the 12 hour step analyses. The differences between OMI data and the assimilation products are

normalized by the observation measurement. We add a rejection threshold of the observed total column when the difference is higher than 40%. With this threshold, very few observations are rejected and the results remain consistent for the whole month, except over the Northern Polar Region (NPR) for the last days of September.

2.2.3 Ozonesondes

Ozone soundings were obtained from the World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre (WOUDC, <http://www.woudc.org/>). We have used data from 11 locations for a total number of 47 observations mainly located in the SH. All of these stations are equipped with Electrochemical Concentration Cell (ECC) sondes. According to laboratory comparisons (Smit et al., 1998), the random variability of the overall data is estimated at about 10 to 15% in the UTLS and near 5% in the middle stratosphere where ozone concentrations are at their maximum.

To compare ozonesondes measurements with our results, all the observed profiles have been interpolated to a common vertical pressure grid. Then, for each interpolated observed profile, the co-located model profile is computed using its nearest neighbours for the spatial interpolation and the assimilation is output at 12 UTC. Following Geer et al. (2006), the difference in the vertical profiles is normalized by a combination of the Logan (1999) tropospheric climatology with the Fortuin and Kelder (1998) stratospheric climatology. The standard deviations of the normalized differences, expressed as percentages, are then computed over the globe and aggregated over latitude bands of 30 degrees, except for the equatorial region where they are averaged over a larger band of 60 degrees. The results are analysed only between the surface and the 5 hPa level since ozonesondes have large errors above that level. Unfortunately, for the period under study, ozone soundings were unavailable for the latitude band $[60^{\circ} N : 90^{\circ} N]$.

3 Production of the ozone analysis

Our objective is to characterize the benefits brought to the ozone assimilation of (i) increasing the CTM horizontal resolution and (ii) increasing the super-observations resolution. Therefore we carried out different assimilation experiments where only the parameters linked to these aspects are modified. The next sections describe the assimilation system, the way we create the two datasets, and the numerical simulations. Then the system consistency is evaluated.

3.1 The assimilation system

3.1.1 The MOCAGE CTM

The CTM used in this study is the MOCAGE model (Peuch, 1999). For most recent MOCAGE applications, the global

horizontal grids are the Gaussian T42 one or the regular $2^\circ \times 2^\circ$ one. In this study, we selected the Gaussian T42 grid and we developed a high resolution version of MOCAGE on the T170 grid. The chosen vertical spacing is the same as the one used in the ECMWF ERA-Interim reanalyses.

The T170 version of MOCAGE becomes numerically costly with a full chemistry scheme. As we are only interested in the ozone distribution, and to save time in our computation, we use the linear ozone parametrisation developed by Cariolle and Teysse re (2007). Combined with the assimilation of stratospheric measurements, this parametrisation produces results that compare well with more comprehensive chemistry schemes (Geer et al., 2006).

Until now, most of our studies with MOCAGE used the ECMWF operational analyses as the meteorological fields that force the CTM. These analyses are computed on a N800 reduced Gaussian grid. It turns out that, for the period under study, the ECMWF operational analyses suffer from a lack of dissipation at the smallest resolved scales. When they are truncated at the T170 resolution, we observe that too much energy remains in the small scales of the dynamical fields. As a consequence, using the truncated dynamical fields from the ECMWF operational analyses in the T170 configuration of MOCAGE produced unrealistic noisy ozone fields. This problem has not been encountered when using the ERA-Interim reanalyses as they are produced on a grid similar to the T170 one. So, in this study, the meteorological fields are derived from the ERA-Interim reanalyses.

As a CTM, MOCAGE works with a linear time interpolation between two forcing steps. This procedure is adequate for the large-scale planetary waves, but we observe that when the time gap between two steps is too large the propagation of the small-scale waves is not well represented. With the high resolution CTM, we compute the linear time interpolation between two meteorological fields separated by 3 hours (instead of the usual 6 hours). This frequency update prevents excessive noise developing in our ozone simulations.

3.1.2 The Valentina assimilation system

The Valentina assimilation system has already been used to assimilate the IASI ozone columns combined with the MLS ozone profiles (Massart et al., 2009). The version of Valentina adopted for the present study is mostly similar to the one used in Massart et al. (2011) where the assimilation algorithm is incremental 4D-Var (Courtier et al., 1994). Our version of the 4D-Var algorithm accounts for the ozone transport by dynamics in the assimilation process but not the chemistry. With this configuration, the 4D-Var assimilation window is set at 12 hours.

To run Valentina with the T170 version of MOCAGE, Valentina had to be adapted to support the increase resolution of the control space. The main change was to carry out the assimilation process in the spectral space despite the CTM

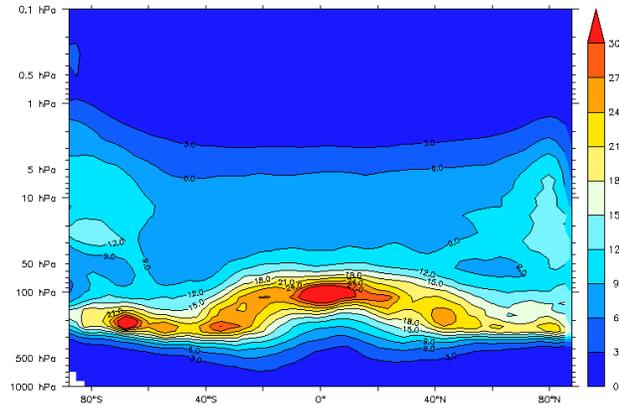


Fig. 1. Zonal mean of the effective ozone standard deviation averaged for the month of September in % on the T42 grid. See text for details.

being discretized in the physical space. With this modification the size of the control vector is reduced.

In the Valentina assimilation system, the forecast error covariance matrix is split into a correlation matrix and a diagonal matrix populated with the forecast error variance (square of the forecast error standard deviation). The forecast error standard deviation is expressed in the physical space. Its value for September comes from the study of Massart et al. (2011) where it is estimated from an ensemble of assimilation simulations. The estimate of the standard deviation matrix was provided on a $2^\circ \times 2^\circ$ grid, and interpolated onto the targeted grid, i.e. T42 or T170.

Following Massart et al. (2011), we assume that the relative values of the background error standard deviation matrix are correct and that a global bias may appear. So we apply diagnostics like those of Desroziers et al. (2005) to determine a multiplicative correction factor, i.e. s_b . In our configuration a value of about ten was found for s_b . Thus we multiplied the background error standard deviation estimates by s_b , giving what we hereafter refer to as an effective standard deviation. Figure 1 shows that on average the effective standard deviation on the T42 grid is higher in the UTLS region with values between 20% and 30%. Below, in the troposphere, the effective standard deviation is very low. In the stratosphere, the effective standard deviation is higher over the NPR and the Southern Polar Region (SPR) with values between 9% and 15%. Elsewhere, the effective standard deviation is rather homogeneous. The shape of the zonal mean of the effective standard deviation is the same for the T170 grid. So, whatever the grid resolution, the assimilation process gives less confidence to the model in the UTLS and over the polar regions in the stratosphere than in the other parts of the atmosphere.

The background error correlation matrix is divided into a horizontal and a vertical operator, both modelled using a dif-

fusion equation (Weaver and Courtier, 2001). We apply a homogeneous horizontal correlation length-scale to apply on the correlation operator. Thus, the correlation operator corresponds in the spectral space to the multiplication of the control vector by a diagonal matrix. The horizontal length-scales are set to 275 km (that corresponds to 2.5° at the equator) for the T42 IASI & MLS assimilation. As shown in Bouttier (1994), the horizontal length-scales decrease in areas with dense observations, so we choose to set the horizontal length-scales to 77 km (that corresponds to 0.7° at the equator) for the T170 IASI & MLS assimilation. For our control vector expressed in the spectral space, we compute the diffusion tensor from the length-scale value and the normalization according to Pannekoucke and Massart (2008). The vertical correlation length-scales are diagnosed from the same ensemble of assimilation runs as the variances and thus vary with location.

With MLS, the random observation error of one level over a profile is assumed to be independent of the random observation error of the other levels along the same profile and of levels over other profiles. This means that there is no spatial nor temporal correlation of the observation error. We also assume that IASI super-observations are uncorrelated with time. With these choices the observation error covariance matrix is diagonal.

3.2 Combined MLS and IASI datasets

Compared with MLS data, IASI data possess several interesting features. The IASI instrument has an excellent horizontal coverage due to the MetOp-A satellite polar orbit and its capability to scan across track over a swath width of ~ 2200 km. It brings information all over the globe, in particular over the poles whereas the MLS instrument does not make any measurement poleward of 82° . IASI measures every 50 km at nadir when the separation between two MLS scans is 1.5° (about 165 km). In addition the total ozone columns from IASI give information for all over the vertical, in particular in the troposphere where little information is given by the MLS measurements.

Following Massart et al. (2009), the statistics for the IASI measurement errors are first derived by the assimilation of the MLS data with both the T42 and T170 configurations of MOCAGE. Then, for each IASI measurement, we compute their differences with the total ozone columns computed from the analysis of the MLS data, and we grid these differences on the T42 or T170 grid. We then assume that the average of the differences is due to a bias that is attributed to the IASI columns. This bias could come from the different methods of the measuring devices (in the IR for IASI and in the microwave for MLS) and from the way the model spreads the column content information within the vertical. We also assumed that the standard deviation of the differences is the standard deviation of the IASI measurement error.

After removing the diagnosed bias from the IASI measurements gridded on the T42 or T170 grid, and after assigning a standard deviation to the IASI measurement error, we assimilate the T42 IASI data with the T42 configuration and the T170 IASI data with the T170 configuration. A posteriori diagnostics similar to those of Desroziers et al. (2005) are used to adjust the mean value of the standard deviation of the observation error and take into account the representativeness error (see Massart et al. (2011) for details on the use of a posteriori diagnostics). In particular we assume that the standard deviation of the observation error has the same shape than the standard deviation of the measurement error, and that there is a multiplicative factor of ~ 2 between them that is given by the a posteriori diagnostics.

We then verify that the total ozone columns computed from the MLS analyses and from the IASI analyses are unbiased in both configurations (T42 and T70). Thus we could combine the data, assuming that the IASI and the MLS observation errors are not correlated.

3.3 The numerical experiments

As detailed previously, we have two configurations of MOCAGE, and two sets of combined MLS and IASI data. Several combinations of the model and the data resolution have therefore been used to assess the relative impact of the model and the data resolutions. In a first step, we have produced ozone fields with direct model simulations (without any assimilation) at the T42 and T170 horizontal resolutions. They are respectively referred to as Ml and Mh, where the first letter M stands for MOCAGE, and the second letter l or h stands for its low or high resolution. These simulations allow us to assess the impact of the model horizontal resolution change without data assimilation, and they also produce a reference from which the impact of the assimilation can be evaluated.

In a second step, we have assimilated the observation set at the T42 resolution with the two model versions and the observation set at the T170 resolution with the high resolution model version. These experiments are referred to as All, Ahl and Ahh, where the first letter A stands for Assimilation, the second letter l or h stands for the MOCAGE resolution, and the third letter l or h means that the data used are at the lowest or highest resolution. The comparison between All and Ahl experiments gives the impact on the analysis of using the CTM at high resolution, and the comparison between Ahl and Ahh gives the impact of increasing the data horizontal resolution.

The experiments are summarized in Table 2, which gives for each experiment the horizontal resolution of the CTM, the assimilated dataset and the horizontal correlation length-scale. In the various figures presented thereafter, the results are plotted respectively in green, red and blue for the All, Ahl and Ahh experiments.

Table 2. Description of experiments.

Exp. name	Model hor. res.	Assim. dataset	Correlation hor. len.-scale
Ml	T42	no	no
Mh	T170	no	no
All	T42	T42 IASI & MLS	2.5°
Ahl	T170	T42 IASI & MLS	2.5°
Ahh	T170	T170 IASI & MLS	0.7°

The period under study covers the month of September 2008 after a 15 days spin-up period. The initial global ozone concentrations for the 15 of August 2008 were taken from a previous assimilation of MLS data generated on a $2^\circ \times 2^\circ$ regular horizontal grid. This initial condition was interpolated onto the T42 and T170 grids.

To determine whether or not an observation is consistent with the model, a rejection threshold for the observations is set to 10% of their difference with the background field projected into the observational space for the three assimilation experiments. Thus, around 2% of the observations are discarded, with around 13% of the MLS observations and less than 1% of the IASI observations (for either super-observations dataset).

3.4 Consistency diagnostics

In order to check the consistency of all our analyses, Fig. 2 shows statistical a posteriori diagnostics. The upper panel represents the variations of the cost function at the minimum divided by half the number of assimilated observations for the month of September. This is known as the χ^2 validation diagnostics. As shown in Desroziers and Ivanov (2001), this diagnostic should approach 1 if the information error covariances are properly specified. The plotted values are close to 1 for the Ahh experiment, which means that the Ahh experiment is well configured. They are greater than 1 for the All experiment, which means that too much confidence has been put in the model or in the observations. And they are lower than 1 for the Ahl experiment, which means that not enough confidence has been put in the model or in the observations. Note that during the lack of IASI data from September 16th to 20th, all values diverge from the optimal value of 1.

To complete this information, the middle and lower panels of Fig. 2 represent other diagnostics introduced by Desroziers et al. (2005). Based on the combinations of assimilated observations minus background, assimilated observations minus analysis, and background minus analysis, multiplicative correction coefficients s_o and s_b are computed. Their square should be applied to \mathbf{R} and \mathbf{B} , the covariances matrix of the observations and forecasts error (that is the calculations $s_o^2\mathbf{R}$ and $s_b^2\mathbf{B}$). s_o or s_b greater (lower) than 1

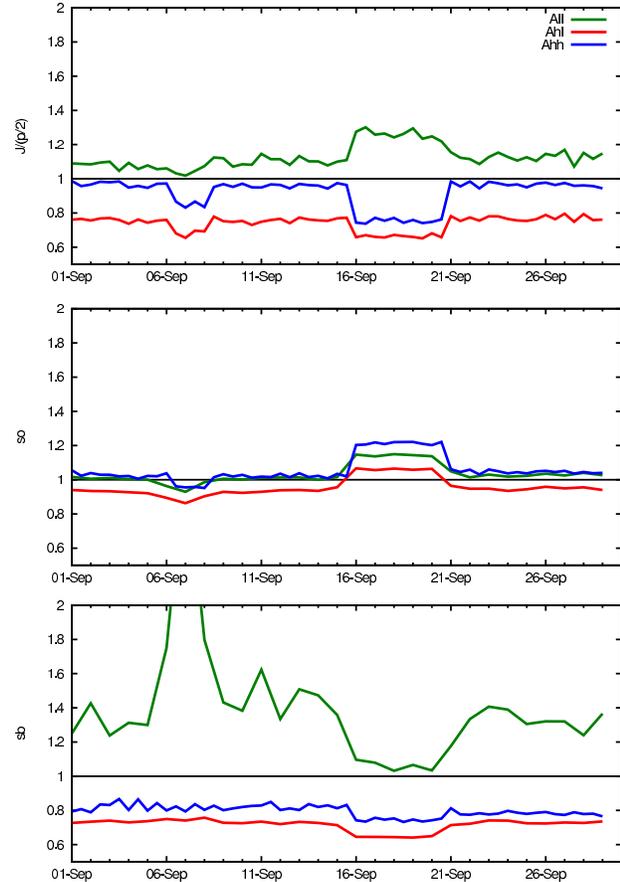


Fig. 2. Diagnostics on data assimilations for All (green), Ahl (red) and Ahh (blue). On top panel values of the cost function at the minimum divided by half the number of assimilated observations. On the middle and lower panels values of the multiplicative correction coefficients for the observation and the forecast errors, respectively.

means that less (more) confidence should be put in the observations or in the model.

Figure 2 shows that s_o coefficients are close to 1 for all experiments, which means that observation errors have been correctly specified. s_o values are greater than 1 during the five consecutive days without IASI observations with the three experiments, which means that less confidence should be put in the observations constructed with MLS data only during that period. Figure 2 also shows with the plot of the s_b coefficients that less confidence should be given to the model for All assimilation (with values greater than 1 for the green line). This is consistent as the T42 lower horizontal resolution is used. For Ahl and Ahh experiments, the confidence in the model should be slightly greater. Overall these diagnostics show that our assimilation system is well configured.

To assess the benefits brought by the model horizontal resolution with and without assimilation, the resulting ozone fields are now intercompared and compared to independent

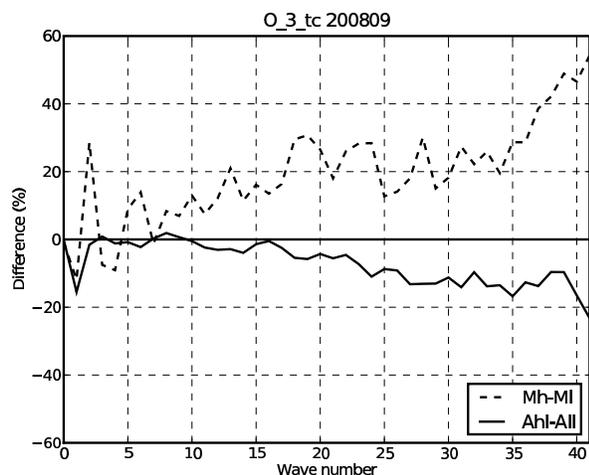


Fig. 3. Monthly average (in %) of the daily differences between the energy spectra e_h and e_l (dashed line), normalized by $(\bar{e}_h + \bar{e}_l)/2$, and between the energy spectra $e_h l$ and $e_l l$ (solid line), normalized by $(\bar{e}_h l + \bar{e}_l l)/2$. See text for details.

data.

4 Impact of the model resolution

In this section, we first compare the ozone products from the MI and Mh MOCAGE simulations at the two horizontal grid resolutions. With this comparison we characterize the effect of increasing the model resolution without any assimilation. Then we look at the All and Ahl data assimilations at the two horizontal grid resolutions.

4.1 The free run simulations

4.1.1 The impact of increasing resolution

In order to know if the experiment with the T170 horizontal grid modifies the large scale structures of the ozone fields, we compute the energy spectra of the total ozone columns from the Mh and MI experiments, that we respectively call e_h and e_l . We then diagnose the monthly average of the daily differences between e_h and e_l , that we denote $\bar{e}_h - \bar{e}_l$, where \bar{e} stands for the monthly average of e . We normalize the $\bar{e}_h - \bar{e}_l$ difference by the mean $(\bar{e}_h + \bar{e}_l)/2$. Figure 3 shows the $\bar{e}_h - \bar{e}_l$ normalized difference plotted up to the 42nd wavenumber. Large differences appeared all over the wavenumbers, with values increasing with the wavenumber. This means that the Mh experiment has changed its large scale structures as well as its small scale structures compared to the MI experiment. The differences are mainly positive, so the fields from the Mh experiment have more wave amplitude compared to those of the MI experiment.

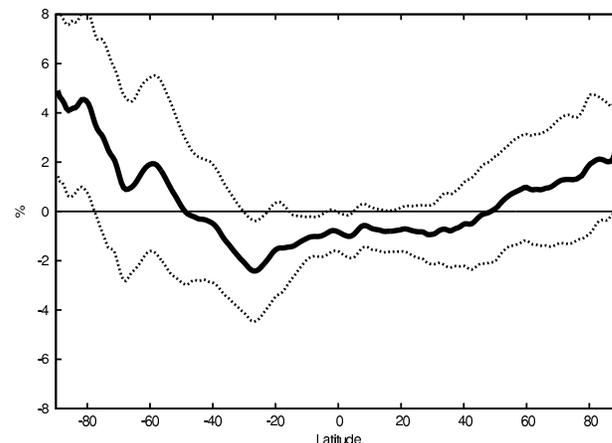


Fig. 4. Zonal difference between the total ozone columns (in %) computed from the Mh and MI experiments, normalized by the total ozone columns from the ERA-Interim reanalysis. The upper and lower dashed lines represent the difference plus or minus the zonal average of the standard deviations. A positive value of the difference means that the total ozone columns from the Mh experiment are higher than the ones from the MI experiment.

4.1.2 Cross-comparison between the simulations

The differences between the ozone concentrations and the total ozone columns from the MI and Mh experiments are first examined.

Figure 4 shows the zonal difference plus and minus the standard deviation between the total ozone columns from both experiments, normalized by the ERA-Interim reanalyses. Compared to MI the Mh simulation produces less ozone between the tropics and more ozone over the poles. The differences are below 2% over the globe, but reach 4% over the SP. The bias in the total ozone columns is significant at the tropics. At mid and high latitudes the ozone variability increases and the biases are only significant around the latitude 70° S.

The top panel of Fig. 5 shows the zonal mean of the monthly average of the differences between the ozone partial pressures from the Mh and MI experiments as a function of the pressure. In the Mh experiment there is less ozone between 45° S and 45° N in the troposphere and in the UTLS region and more ozone over the polar regions. This is consistent with the differences found in the total ozone columns as shown in Fig. 4. The highest differences are located over the poles in the UTLS where they exceed 1 mPa whereas they are below 0.5 mPa elsewhere.

The lower panel of Fig. 5 shows the zonal mean of the monthly standard deviation of the differences between the ozone partial pressures from the Mh and MI experiments. It shows that the variability is mainly located over the troposphere and the UTLS regions. The maximum values are lo-

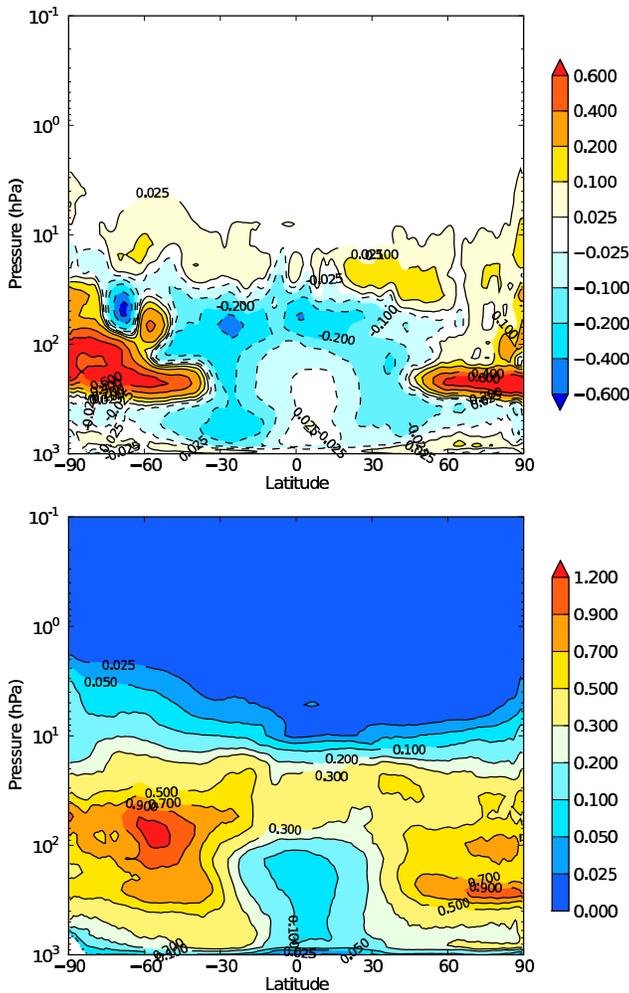


Fig. 5. Zonal difference (top) and standard deviation (bottom) between the ozone partial pressure from the MI and Mh experiments (in mPa). A positive value of the difference means that the ozone concentrations from the Mh experiment are higher than the ones from the MI experiment.

cated at the polar vortex boundary between 50 and 100 hPa with values above 1.2 mPa, in regions that are more dynamically active.

To further illustrate the differences between the Mh and MI experiments, Fig. 6 represents the ozone fields centred over the SPR in the middle stratosphere from MI and Mh experiments (on top at left and at the middle) for September 30th and 55 hPa. It can be seen that the ozone hole is already well developed. The shape of the ozone hole is slightly different between the Mh and MI experiments, and the structures around the ozone hole also differ. As previously discussed the Mh experiment has a higher spatial variability in the ozone fields in regions with large ozone gradients and active dynamics, two characteristics that are encountered at the

vortex boundary.

There is a clear impact of an increase of the model horizontal resolution on the ozone distribution in the free run simulations. A large part of the difference comes from the vertical velocity amplitude that is increasing with the model resolution. The vertical velocity possesses strong horizontal gradients and local extrema are smoothed with the low resolution while with the high resolution model most of its small scale characteristics are retained.

4.2 Changes in the analysis

We examine here the impact of increasing the model resolution on the ozone analysis. To assess the benefits brought by the change of model resolution with the T42 IASI & MLS dataset assimilation, the analyses are compared to independent data. We choose to compare them with another global assimilation system, i.e. the ERA-Interim reanalysis, with profiles from ozonesondes and with total ozone columns from the OMI. When the low resolution model results are compared to the independent datasets (that is done in the physical space), they are projected on the T170 grid. Thus the error of representativeness is the same for all the experiments.

4.2.1 Diagnostics from the analyses

As previously done for the Mh and MI MOCAGE simulations, we have computed the energy spectra of the total ozone columns from the Ahl and All experiments, that we respectively call e_{hl} and e_{ll} . We then computed the monthly average of the daily differences between e_{hl} and e_{ll} , that we note $\overline{e_{hl} - e_{ll}}$, and normalized them by the mean $(\overline{e_{hl}} + \overline{e_{ll}})/2$. Figure 3 shows the $\overline{e_{hl} - e_{ll}}$ normalized difference. The difference is lower compared to the $\overline{e_h - e_l}$ difference. This suggests that the Ahl and All experiments have more common structures than the Mh and MI experiments have themselves. The differences are significant for the high wavenumbers and are negative. This means that the analyses from the All experiment possess more energy compared to the analyses from the Ahl experiment. But the differences are very low for the small wavenumbers, so the largest structures are similar for the fields from the All and Ahl experiments. This can be directly seen in the fields from the All and Ahl experiments shown in Fig. 6.

Assimilating the T42 IASI & MLS data produces ozone analyses that agree well with the ozone fields from the ERA-Interim reanalysis at 55 hPa on September 30th, both inside the polar vortex and outside at its boundary (Fig. 6). Strong gradients at the boundary of the polar vortex are present in the ozone fields from the All, Ahl and ERA-Interim experiments, whereas they are smoother in the ozone fields from the MI and Mh experiments.

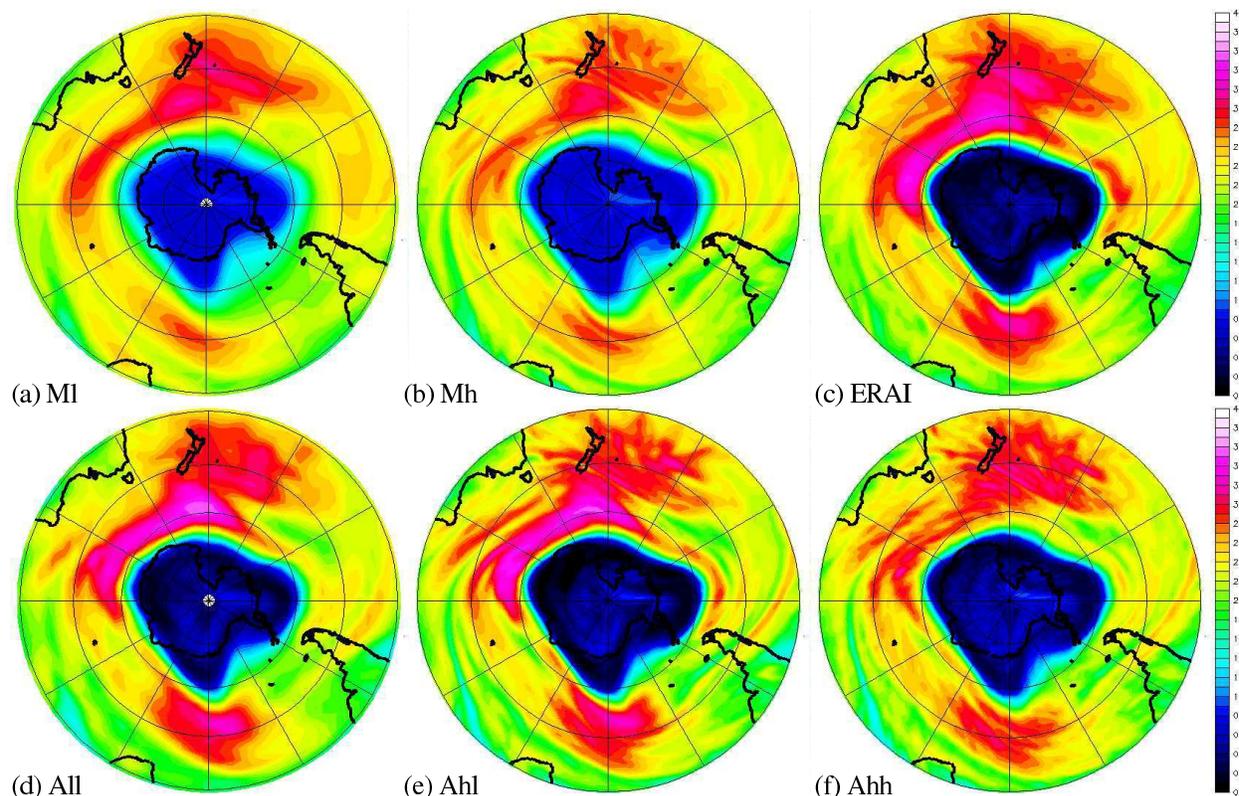


Fig. 6. Ozone volume mixing ratio (in Parts per Million by Volume or ppmv) centred over the Southern Hemisphere at 55 hPa on September 30th at 12 UTC. Data come from our 5 experiments (a-e; see Table 2 for details) and from the ERAI reanalysis (f).

4.2.2 Comparisons with ERA-Interim reanalysis

Figure 7 shows that the zonal bias in terms of total ozone columns compared to the ERA-Interim reanalysis is nearly the same for the Ahl and All experiments. This means that the impact of the horizontal grid resolution on the direct model as shown in Fig. 4 is partly removed by the assimilation. This is consistent with the very low differences found for the small wavenumbers (Fig. 3). Nevertheless, in the Ahl and All analyses, there is an underestimation of the total ozone columns over the SP and between 20° S and 40° N, the zonal bias reaching 6-7%. Between 80° S and 60° S and over the NP, the Ahl and All analyses overestimate the total ozone columns compared to ERA-Interim reanalyses, the zonal bias reaching 4-5%. For the standard deviations of the differences with the ERA-Interim reanalyses, Fig. 7 shows that they are largest over the SP with values up to 14% whereas they are around 5-6% between 80° S and 60° S in the polar vortex region, and they do not exceed 4% elsewhere. The difference between the All and Ahl experiments in terms of standard deviation of the differences with ERA-Interim data does not exceed 1%. The largest differences are located over the poles and at the polar vortex boundary where small scale phenomena, with high variability, occur. There

the Ahl experiment is more consistent with the ERA-Interim analysis.

We now look at the characteristics of the vertical variability of the differences between the All and Ahl experiments. We define σ_{hl} as the zonal average of the standard deviation of the differences [Ahl–ERA-Interim] and σ_{ll} as the zonal average of the standard deviation of the differences [All–ERA-Interim] (both in partial pressure). Figure 8 shows the latitude-pressure distribution of $\sigma_{hl} - \sigma_{ll}$. In terms of ozone variability, the Ahl experiment has globally a better agreement with the ERA-Interim reanalysis than the All experiment. This is significant in the Northern Hemisphere (NH) poleward of 60° N between 300 hPa and 20 hPa and in the Southern Hemisphere (SH) poleward of 30° S between 300 hPa and 40 hPa. Over the NP, there is the highest enhancement, mainly between 100 hPa and 20 hPa. The improvements in the analyses are located in areas with strong ozone gradients and active dynamics with small scale structures.

4.2.3 Comparisons with ozonesondes

Figure 9 shows the zonal and monthly average of the standard deviation of the normalized ozone differences between the

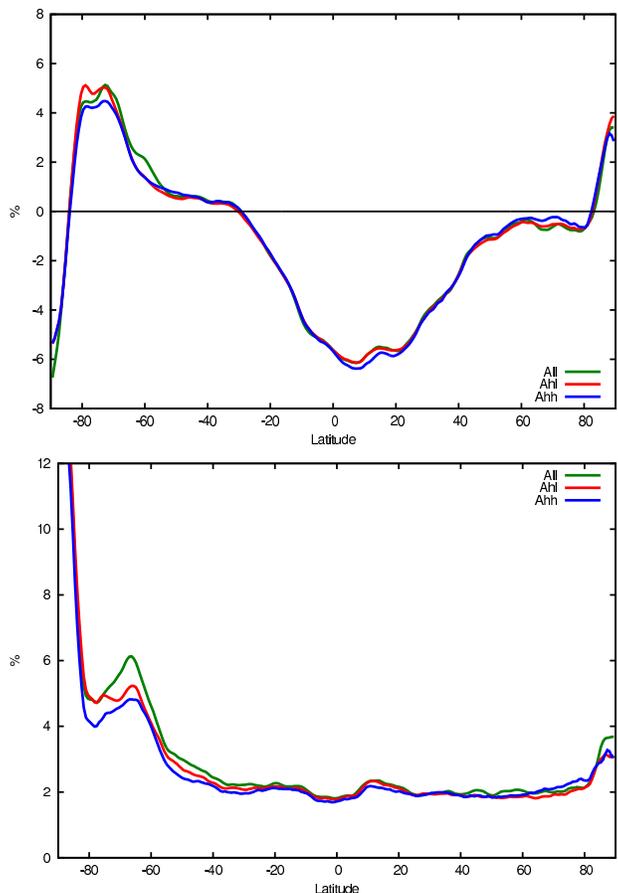


Fig. 7. Total ozone columns zonal difference (top, in %) and zonal average of the total ozone columns standard deviation (bottom, in %) between [All – ERA-Interim] (green), [Ahl – ERA-Interim] (red) and [Ahh – ERA-Interim] (blue). See text for details. The differences are normalized by the total ozone columns from the ERA-Interim reanalysis.

All and Ahl experiments and the ozonesondes. It also shows the standard deviation of the differences between the Mh experiment and the ozonesondes. The variability of the error of the ozone fields from the Mh experiment is globally below 20% above 68 hPa compared to the ozonesondes measurements. This value is of the same magnitude as the measurement error. The error grows below 68 hPa and reaches about 40% in the UTLS (globally), between 150 and 300 hPa. This error below 68 hPa is different for each band of latitude and is particularly fluctuating in the $[60^{\circ} S : 30^{\circ} S]$ and $[30^{\circ} N : 60^{\circ} N]$ bands where it reaches its highest variability and its highest values (up to 50%).

Globally the Ahl analysis shows a better agreement with ozonesonde variations than the Mh simulation, thus reducing the error up to 10%, especially in the stratosphere but also in the troposphere except near the high latitude tropopause. For example, the error increases by 20% in the $[60^{\circ} S : 30^{\circ} S]$

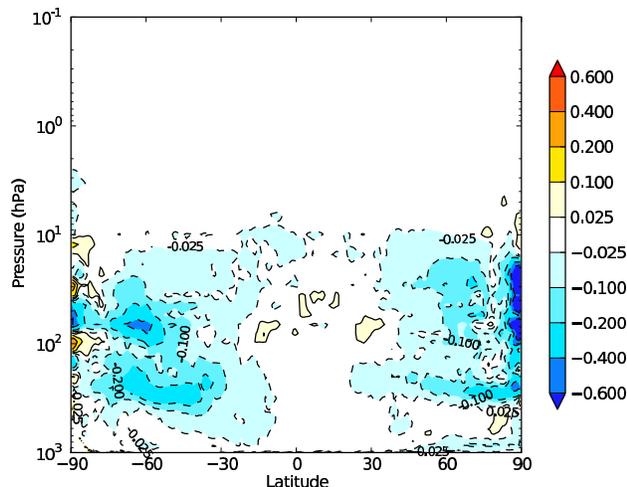


Fig. 8. Zonal and monthly average of the standard deviation of the differences between the Ahl analysis and the ERA-Interim reanalysis minus the standard deviation of the differences between the All analysis and the ERA-Interim reanalysis (in mPa). Positive values indicate that the All experiment has a better agreement with the ERA-Interim reanalysis than the Ahl experiment, and negative values the opposite.

band near the high latitude tropopause. We already diagnosed a similar behaviour in that region with the assimilation of the MLS data, a result likely due to the larger variability of the MLS data in the UTLS. The information brought by the ozone columns from the T42 IASI data is thus not sufficient to constrain the analysis in this region. The use of the IASI AKs could improve the vertical spreading of the information and could cope with that difficulty.

Compared to ozonesondes the Ahl analysis performs better than the All analysis. But here again, no systematic picture emerges. For example, the All analysis shows an error increase of 15% at 250 hPa in the $[60^{\circ} S : 30^{\circ} S]$ band compared with the Ahl analysis, whereas the Ahl analysis already has an error increase of 20% compared to the Mh simulation. But in the $[90^{\circ} S : 60^{\circ} S]$ band, results from the All analysis are better throughout almost all the vertical range.

4.2.4 Comparisons with OMI

The upper panel of Fig. 10 shows the zonal and monthly bias between each of the Mh, All and Ahl experiments and the OMI total ozone columns. Consistent with what has been diagnosed previously, the ozone fields from the Mh experiment have much better agreement with the OMI data than the ozone fields from the MI experiment. So only the fields from the Mh experiment are plotted. Fig. 10 shows that the Mh experiment systematically overestimates the total ozone columns in the high latitudes by 5% to 20% and underestimates them between $20^{\circ} S$ and $40^{\circ} N$ up to 10%. The as-

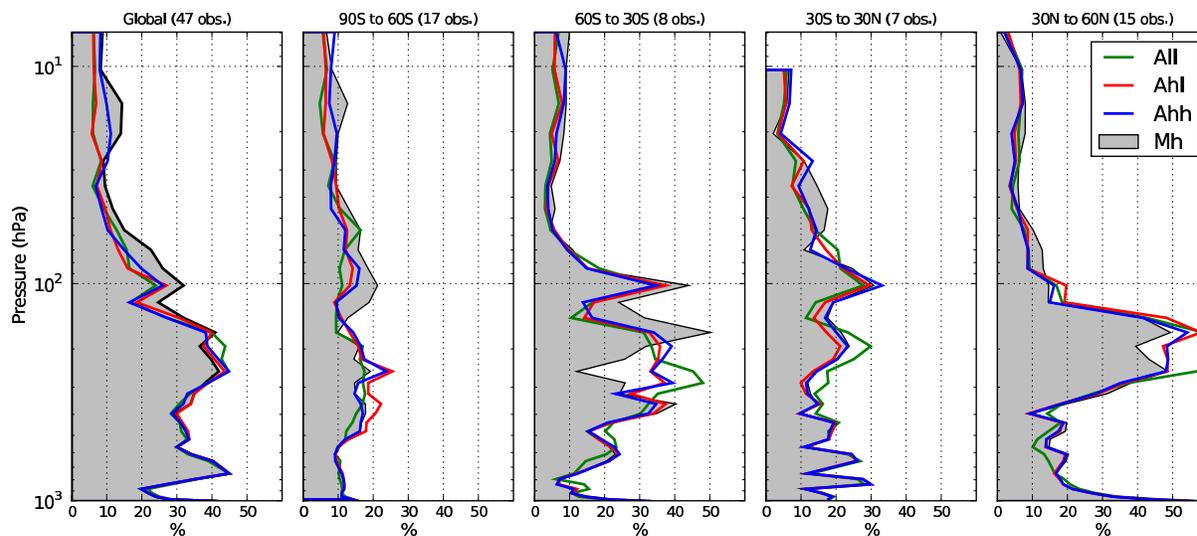


Fig. 9. Zonal average of the standard deviations of [Mh – ozonesondes] (gray-colored), [All – ozonesondes] (green), [Ahl – ozonesondes] (red) and [Ahh – ozonesondes] (blue), normalized by the climatology. The latitude band limits and the number of used ozonesonde profiles are given in the title of each sub-plot. See text for details.

simulation of the T42 IASI & MLS data reduces significantly the bias everywhere for both configurations of the CTM; the analyses also slightly underestimate the total ozone columns everywhere but the poles. The overestimation over the poles may be due to the absence of MLS data poleward of $82^\circ N$ or $82^\circ S$. One can note that, everywhere but in the SPR, the distribution of the biases is identical to the one obtained by comparison with the total ozone columns from the ERA-Interim reanalyses (shown in Fig. 7).

The lower panel of Fig. 10 shows the zonal and monthly average of the standard deviation of the differences between each of the Mh, All and Ahl experiments and the total ozone columns from OMI. The total ozone columns computed from the Mh experiment deviate by 2% to 3% from the OMI ones at most latitudes. The error is however larger between $55^\circ S$ and the SP where it reaches up to 9%. In this region with high ozone variability the All and Ahl analyses show major improvements by reducing the standard deviations by 3% on average. Over the rest of the globe the All and Ahl analyses provide a slight reduction of the standard deviation, in particular between $30^\circ N$ and $80^\circ N$ where they are reduced by 1%. For the All experiment there is one exception to this improvement located over the NP where the standard deviations are nearly increased by 1%. As for the comparison with the ERA-Interim reanalysis, the difference between the All and Ahl experiments in terms of standard deviation of the differences with OMI data does not exceed 1%, with largest differences at the polar vortex boundary.

5 The high resolution analysis

5.1 The high resolution experiment

Table 3 gives the number of IASI observations used to make a super-observation within a model cell for each cell of the T42 and the T170 grids and their variability within the T42 cells, averaged for the month of September and by latitude bands. The standard deviation (in %) is computed only if there is at least two observations within a cell. The averaged number of IASI observations within a cell decreases from mid latitudes to the poles. For the T42 IASI dataset, the average of the standard deviation is highest between $60^\circ S$ and the SP with an average value of 4.3% whereas it is around 2.2% elsewhere. This highest value could be explained by the fact that with this resolution, a cell may contain ozone observations from both sides of the polar vortex edge across which there are large gradients in the ozone concentration.

When averaging the observations within the T170 model cell instead of the T42 model cell, the number of observations becomes very low with 1 to 2 observations per cell. The IASI observations are close to the model resolution, and the assimilation system should be able to extract the information contained in the IASI data at the lowest resolved scales when they are averaged on the T170 high resolution grid.

For the T42 IASI & MLS assimilation, we have used a homogeneous value of 275 km for the horizontal correlation length-scale of the background error. But with such a value for the horizontal correlation length-scale, we are not able to represent the structures that are smaller than this size. This is illustrated by Fig. 11 that displays (from left to right) the total

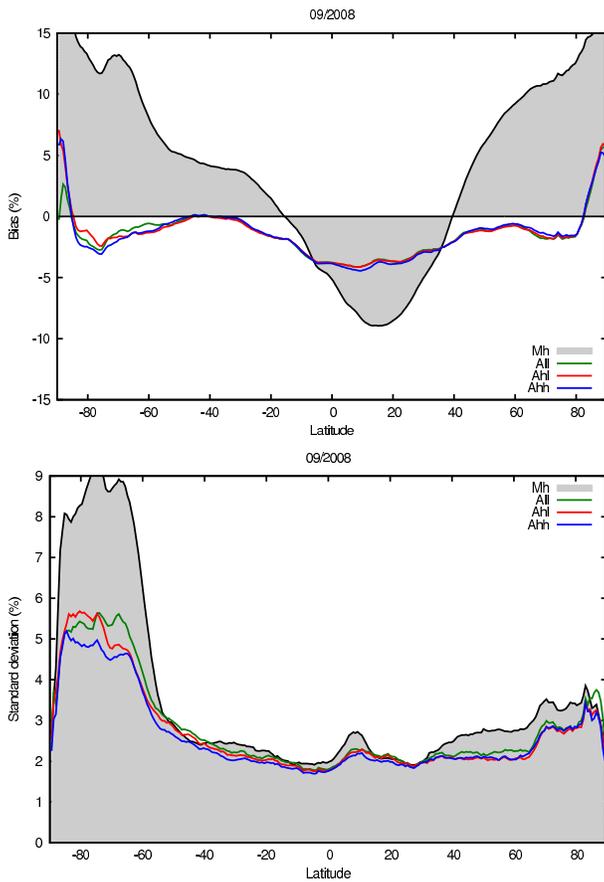


Fig. 10. Zonal difference (top, in %) and zonal average of the standard deviation (bottom, in %) between the total ozone columns computed from the Mh simulation and OMI (gray-colored), from the All analysis and OMI (green), from the Ahl analysis and OMI (red) and from the Ahh analysis and OMI (blue). See text for details.

Table 3. IASI super-observations features. See text for details.

Latitudes	Grid T42 Nb. of obs.	Std.	Grid T170 Nb. of obs.
90° S : 60° S	5.2	4.3	1.2
60° S : 30° S	10.1	2.4	1.7
30° S : 30° N	14.8	2	2.2
30° N : 60° N	10.8	2.3	1.8
60° N : 90° N	5	2.3	1.2
global	10.2	2.5	1.7

ozone columns fields and increments from the IASI super-observations gridded on the T170 grid and from our Ahh analysis over a sector delimited by the [70° S : 40° S] latitude band and the [20° E : 60° E] longitude band on September 30th.

Figure 11(a) shows that the T170 IASI data accumulated between 00 UTC and 12 UTC have high spatial variability. This spatial variability is also observed in the total ozone columns field at 00 UTC resulting from the Ahh experiment after a 12 hour forecast (Fig. 11(b)). The simulated field shows fine-scale structures which seem consistent with the observations despite the temporal shift.

The increment computed at 00 UTC, on the T170 grid but with the 275 km horizontal length-scale, has structures that are too large to account for the fine-scale structures observed in the data (Fig. 11(c)). The analysis made with the 77 km horizontal length-scale (Fig. 11(d)) shows structures in the increment of the total ozone column that have a size and a shape in better agreement with the model and the super-observation horizontal resolutions.

In this study, we have considered that there is no correlation between the observation errors, and that the horizontal correlation length-scale of the background error is small enough to separate the influence of each observation from the others. In the following, we estimate the impact of using super-observations on a smaller grid size by comparing the Ahl and Ahh experiments with independent observations. As shown in Liu and Rabier (2003), increasing the observation density for this uncorrelated-error case should improve our analysis. Then we look at some results at synoptic scale to further characterize the impact of increasing the observation density.

5.2 Comparisons with independent observations

The differences between the zonally averaged total ozone columns from the Ahl and Ahh experiments and the ERA-Interim reanalyses or the OMI data are shown in the upper panels of Fig. 7 and Fig. 10. They differ from less than 1% between 80° S and 70° S. The differences are smaller for the Ahl experiment when compared to OMI data, whereas for Ahh the smallest deviations are found when compared to the ERA-Interim reanalysis. Elsewhere the values of the differences are similar.

As shown in the lower panels of Fig. 7 and Fig. 10, the zonal average of the standard deviation between the Ahl experiment and the ERA-Interim and OMI data is different from the one between the Ahh experiment and the ERA-Interim and OMI data. Increasing the grid resolution on which IASI observations have been averaged with the 77 km horizontal correlation length-scale reduces the standard deviations. For the Ahh experiment, compared to the OMI total ozone columns, the error never exceeds 5% in the SPR, and compared to the ERA-Interim reanalyses the error is lower than 5% in the SPR everywhere but beyond 80° S.

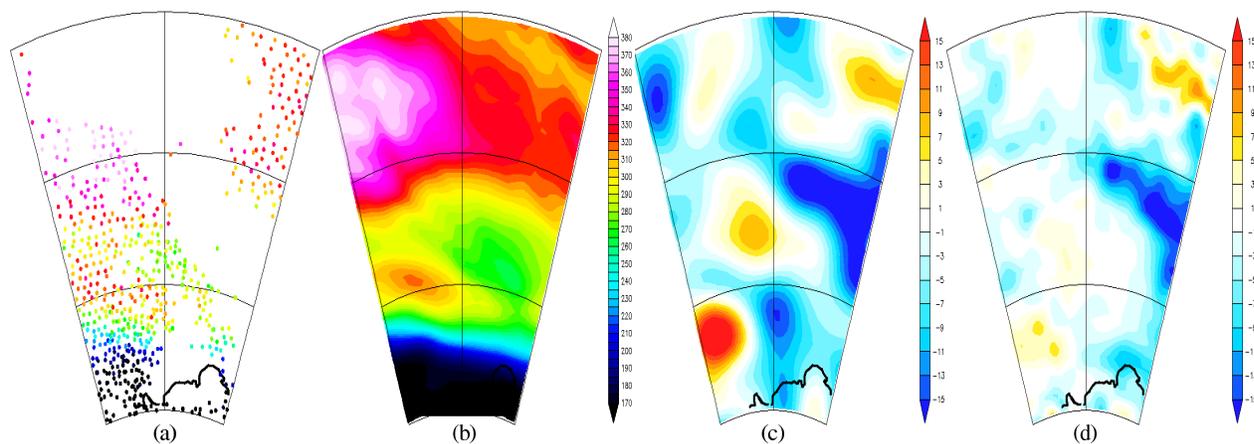


Fig. 11. Zoom over the SP between the latitudes $70^{\circ} S$ and $40^{\circ} S$ and between the longitudes $20^{\circ} E$ and $60^{\circ} E$ on September 30^{th} . On panel (a), the T170 IASI measurements cumulated between 00 UTC and 12 UTC. On panel (b), the total ozone columns field at 00 UTC resulting from the Ahh experiment after a 12 hour forecast. Data values on panels (a) and (b) are in Dobson Units (DU) as specified in the (b) legend. On panels (c) and (d) is shown the increment (in DU) computed at 00 UTC for the ozone total columns field on (b). The horizontal length-scales of the assimilation are set to 275 km for (c) and to 77 km for (d).

Fig. 9 shows that the fields from the Ahh and Ahl experiments agree to the same order with the ozonesondes over most of the vertical range. But the error is slightly increased between 10 and 30 hPa. It suggests that the information coming from the T170 IASI dataset has not been correctly distributed in the vertical.

5.3 Results at synoptic scale

Fig. 6 shows that the ozone field from the Ahh experiment at 55 hPa shows small-scale structures that have shapes that are not present in the ERA-Interim reanalysis and the Ahl experiment. In addition, the ozone concentration inside the polar vortex is slightly higher for the Ahh experiment than for the Ahl experiment and the ERA-Interim reanalysis. The ozone concentration inside the largest structures surrounding the polar vortex are also lower than for the Ahh experiment. As a result, the horizontal ozone gradient at the polar vortex boundary is smoother for the Ahh experiment. The similarity at 55 hPa between the ERA-Interim reanalysis and the Ahl experiment is likely due to the assimilation of the MLS data in both experiments, and the difference compared to the Ahh experiment comes from the decrease of the correlation horizontal length scale which reduces the influence of MLS data on the Ahh analyses.

These changes of the ozone concentrations at 55 hPa are illustrated in the top panels of Fig. 12. They represent the ozone volume mixing ratio from latitude $50^{\circ} S$ to the SP along the longitudes $60^{\circ} W$ (at left) and $120^{\circ} E$ (at right) for the Mh, Ahl and Ahh experiments and the ERA-Interim reanalysis. Along the $90^{\circ} W$ longitude the Ahh and Ahl analyses are in good agreement with the ERA-Interim analysis,

and show an improvement over the Mh simulation which significantly underestimate the ozone inside the polar vortex. But along the $120^{\circ} E$ longitude the Ahh simulation is not doing better than the Mh simulation and degrades the results compared to the Ahl analyses.

The same plots are made for the total ozone columns on the lower panels of Fig. 12. The difference visible between the Ahl and Ahh experiments at 55 hPa (Fig. 6) is no longer present when considering the total column. The Ahl and Ahh analyses agree very well with ERA-Interim and show a real improvement compared to the Mh simulation. However the vertical distribution of ozone is quite different in Ahh from Ahl. The Ahl results are closer to the ERA-Interim analyses. The number of vertical soundings is not sufficient to determine which analysis is the best.

5.4 Relative weight of the observations

The results found in the two previous sections suggest that the information coming from the T170 IASI dataset has not been sufficiently constrained by the MLS ozone profiles. When assimilating the T170 IASI data instead of the T42 IASI data, we multiplied by about 5 the number of assimilated data coming from the IASI instrument as shown in Table 1. With the decrease of the horizontal correlation length-scale with increasing resolution many cells of the model have not used any MLS profile in the Ahh analysis since the horizontal resolution of MLS is much lower than the IASI one. Thus in the Ahh experiment, for many cells of the model the ozone repartition is no longer constrained by the T170 IASI & MLS dataset but only by the T170 IASI data.

Figure 13 shows the zonal and monthly averaged differ-

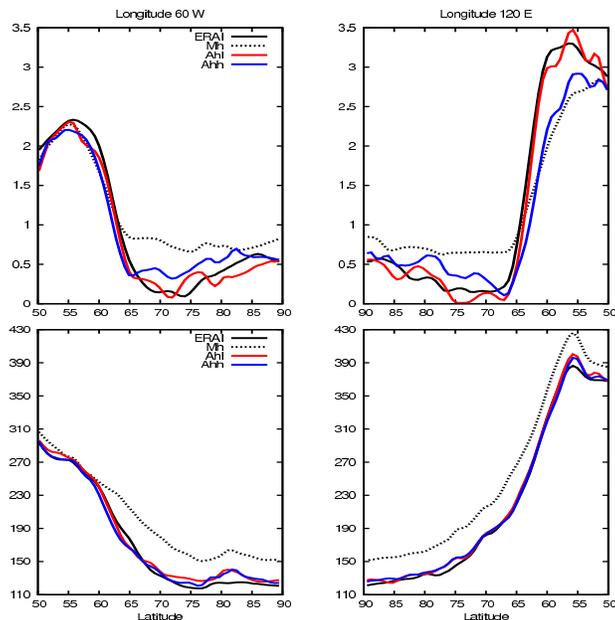


Fig. 12. Ozone volume mixing ratio (top, in ppmv) and total ozone columns (in DU) along the longitudes $60^\circ W$ on the left and $120^\circ E$ on the right, from latitude $50^\circ S$ to the SP, at 55 hPa on September 30^{th} at 12 UTC. Data come from ERA-Interim reanalyses (solid black) and Mh (dashed black), Ahl (red) and Ahh (blue) experiments.

ence between the ozone partial pressure from the Ahl and Ahh experiments. The differences are much larger than the ones found between the Mh and MI experiments (shown in Fig. 5). As the comparison with the ERA-Interim reanalysis and the OMI data showed that the total ozone columns from the Ahl and Ahh experiments are similar, the differences on Fig. 13 confirm that the constraint on the vertical distribution given by the MLS data is less efficient in the Ahh data assimilation. The vertical ozone repartition has thus been deteriorated by the increase of density of the ozone columns. To cope with this problem the solution is likely to involve using the IASI AKs.

6 Conclusions

From a version of the MOCAGE CTM on the T42 horizontal Gaussian grid, we have developed a new version on the T170 grid. We have adapted our Valentina assimilation system to work in the spectral space and to reduce the numerical cost due to the increase of the horizontal resolution. We have combined the MLS and the IASI ozone data to make two super-observations datasets at T42 and T170 resolutions.

The direct simulations of MOCAGE for the month of September 2008 show that the increase of the horizontal resolution modifies the simulated ozone concentrations not only at the smallest scales but also at the largest scales. Moreover,

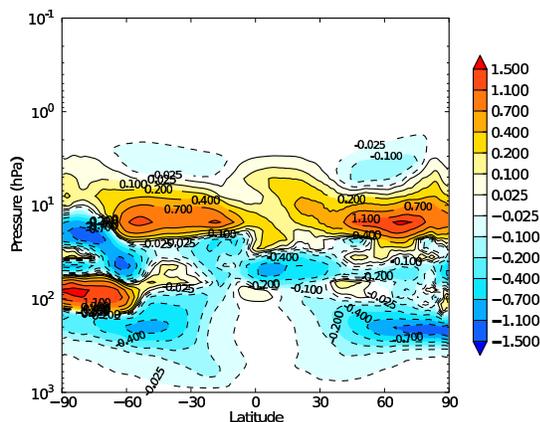


Fig. 13. Zonal difference between the ozone partial pressure from the Ahl and Ahh experiments (in mPa). A positive value of the difference means that the ozone concentrations from the Ahh experiment are higher than the ones from the Ahl experiment.

the horizontal resolution may influence by more than 1 mPa the ozone concentration, mainly in the UTLS, and by more than 5% the total ozone columns, mainly over the NPR and the SPR. These modifications are linked to a better representation of the vertical velocities within the T170 configuration.

With the assimilation of the T42 IASI & MLS dataset the increase of the CTM horizontal resolution showed a mainly positive but small influence on the ozone analyses. The differences, compared to the ERA-Interim reanalysis or to the OMI data, between the total ozone columns from the Ahl and Ahh experiments are very small (lower than 1%). Nevertheless the resolution increase brings a better agreement with the ERA-Interim ozone concentrations in terms of variability. For the comparison with the ozonesondes, results are globally slightly better but are deteriorated at some vertical levels.

Finally, assimilating the T170 IASI dataset improves the variability of the total ozone columns compared to the ERA-Interim reanalysis and the OMI data in the $[90^\circ S : 60^\circ S]$ latitude band. The horizontal correlation length-scale of the background error has to be adapted to represent the small-scale structures present in the observations. But this change of the horizontal correlation length-scale reduces the influence of the MLS data compared to the new and finer T170 IASI data. Thus the information coming from the T170 IASI data are not sufficiently constrained in the vertical. Also, the horizontal gradient of the ozone concentrations at the polar vortex boundary at 55 hPa is smoother than with the ERA-Interim reanalysis or with the Ahl experiment. The zonal difference between the ozone partial pressure from the Ahl and Ahh experiments shows significant differences in the ozone fields that are not restricted to the 55 hPa pressure level but

spans over the middle stratosphere. This result points out the need to have a source of information on the vertical ozone distribution that is as dense as the total column dataset assimilated. In our configuration the MLS data is too coarse compared to the IASI data, and the use of IASI AKs appears unavoidable.

To further improve the assimilation one could also consider the use of anisotropic and inhomogeneous horizontal length-scales to better extract the high resolution information within the observations. Our framework is also well suited for further high resolution related developments as, for instance, multi-incremental 4D-Var. This could be combined with an adaptive pre-conditioning, working in a successive manner on a T42 low resolution model grid, then on a T85 intermediate one and finally on the targeted T170 high resolution one.

Finally, we have concentrated our analysis on a limited period of time (the month of September). We plan to extend our assimilation period to cover several years in order to verify that our conclusions are still valid for other seasons, and to characterize the interannual variability of our analyses.

Acknowledgements. B. Pajot was supported by a grant from the Fondation d'Entreprise EADS (<http://www.fondation.eads.net/fr>).

For W. A. Lahoz, this work was funded by the RTRA/STAE (project POGQA) funded by Région Midi-Pyrénées, and an internal project at NILU.

P. F. Coheur is Research Associate (Chercheur Qualifié) with F. R. S.-FNRS. The research in Belgium was funded by the F. R. S.-FNRS, the Belgian State Federal Office for Scientific, Technical and Cultural Affairs and the European Space Agency (ESA-Prodex arrangements). Financial support by the 'Actions de Recherche Concertées' (Communauté Française de Belgique) is also acknowledged.

Thanks to Brice Barret from the Laboratoire d'Aérodynamique (LA) for the ozonesondes data processing.

IASI has been developed and built under the responsibility of the Centre National d'Etudes Spatiales (CNES, France). It is flown on-board the Metop satellites as part of the EUMETSAT Polar System.

The development of the Valentina assimilation system has benefited from the support of the Ether centre for atmospheric chemistry products and services (<http://ether.ipsl.jussieu.fr>).

References

- Allen, D., Pickering, K., Duncan, B., and Damon, M.: Impact of lightning NO emissions on North American photochemistry as determined using the Global Modeling Initiative (GMI) model, *J. Geophys. Res.*, 115, D22301, doi:10.1029/2010JD014062, 2010.
- Balis, D., Kroon, M., Koukouli, M. E., Brinksma, E. J., Labow, G., Veeffkind, J. P., and McPeters R. D.: Validation of Ozone Monitoring Instrument ozone total column measurements using Brewer and Dobson spectrophotometer ground-based observations, *J. Geophys. Res.*, 112, D24S46, doi:10.1029/2007JD008796, 2007.
- Berrisford, P., Dee, D., Fielding, K., Fuentes, M., Kallberg, P., Kobayashi, S., and Uppala S.: The ERA-Interim archive, version 1.0, in: ERA report series, available at: <http://www.ecmwf.int/publications/>, 2009.
- Bouttier, F.: A dynamical estimation of forecast error covariances in an assimilation system, *Mon. Weather Rev.*, 122(10), 2376–2390, 1994.
- Buis, S., Piacentini, A., and Déclat, D.: PALM: A Computational framework for assembling high performance computing applications, *Concurr. Comp. - Pract. E.*, 18(2), 247–262, 2006.
- Cariolle, D. and Teyssède, H.: A revised linear ozone photochemistry parameterization for use in transport and general circulation models: multi-annual simulations, *Atmos. Chem. Phys.*, 7, 2183–2196, 2007.
- Clarisse, L., R'Honi, Y., Coheur, P.-F., Hurtmans, D., and Clerbaux, C.: Thermal infrared nadir observations of 24 atmospheric gases, *Geophys. Res. Lett.*, 38, L10802, doi:10.1029/2011GL047271, 2011.
- Clerbaux, C., Coheur, P.-F., Boynard, A., Clarisse, L., Hadji-Lazaro, J., Hurtmans, D., George, M., Pommier, M., Razavi, A., Turquety, S., and Wespes, C.: Monitoring of atmospheric composition using the thermal infrared IASI/METOP sounder, *Atmos. Chem. Phys.*, 9, 6041–6054, 2009.
- Courtier, P., Thépaut, J.-N., and Hollingsworth, A.: A strategy for operational implementation of 4D-Var, using an incremental approach, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 120, 1367–1387, doi:551.509.313.22, 1994.
- Dee, D. P., Uppala, S. M., Simmons, A. J., Berrisford, P., Poli, P., Kobayashi, S., Andrae, U., Balmaseda, M. A., Balsamo, G., Bauer, P., Bechtold, P., Beljaars, A. C. M., van de Berg, L., Bidlot, J., Bormann, N., Delsol, C., Dragani, R., Fuentes, M., Geer, A. J., Haimberger, L., Healy, S. B., Hersbach, H., Hólm, E. V., Isaksen, I., Kallberg, P., Köhler, M., Matricardi, M., McNally, A. P., Monge-Sanz, B. M., Morcrette, J.-J., Park, B.-K., Peubey, C., de Rosnay, P., Tavolato, C., Thépaut, J.-N. and Vitart, F.: The ERA-Interim reanalysis: configuration and performance of the data assimilation system, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 137, 553–597, doi:10.1002/qj.828, 2011.
- Desroziers, G., Berre, L., Chapnik B., and Poli, P.: Diagnosis of observation, background and analysis-error statistics in observation space, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 131(613), 3385–3396, 2005.
- Desroziers, G. and Ivanov, S.: Diagnosis and adaptive tuning of information error parameters in a variational assimilation, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 127, 1433–1452, 2001.
- Dragani, R.: On the quality of the ERA-Interim ozone reanalysis, Part I Comparisons with in situ measurements, Submitted for publication to *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, in: ERA report series, available at: <http://www.ecmwf.int/publications/>, 2010.
- Dragani, R.: On the quality of the ERA-Interim ozone reanalysis, Part I Comparisons with satellite data, Submitted for publication to *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, in: ERA report series, available at: <http://www.ecmwf.int/publications/>, 2010.
- Dufour, G., Eremenko, M., Griesfeller, A., Barret, B., LeFlochmoën, E., Clerbaux, C., Hadji-Lazaro, J., Hurtmans, D., and Coheur, P.-F.: Validation of different scientific ozone products from IASI using ozonesondes, Atmospheric Measurement Techniques Discussion, submitted, 2011.
- Errera, Q., Daerden, F., Chabrilat, S., Lambert, J. C., Lahoz, W. A., Viscardy, S., Bonjean, S., and Fonteyn, D.: 4D-Var Assimilation

- of MIPAS chemical observations: ozone and nitrogen dioxide analyses, *Atmos. Chem. Phys.*, 8, 6169–6187, 2008.
- Fortuin, J. P. F. and Kelder, H.: An ozone climatology based on ozonesonde and satellite measurements, *J. Geophys. Res.*, 103, 31, 709–734, 1998.
- Froidevaux, L., Jiang, Y. B., Lambert, A., Livesey, N. J., Read, W. G., Waters, J. W., Browell, E. V., Hair, J. W., Avery, M. A., McGee, T. J., Twigg, L. W., Sumnicht, G. K., Jucks, K. W., Margitan, J. J., Sen, B., Stachnik, R. A., Toon, G. C., Bernath, P. F., Boone, C. D., Walker, K. A., Filipiak, M. J., Harwood, R. S., Fuller, R. A., Manney, G. L., Schwartz, M. J., Daffer, W. H., Drouin, B. J., Cofield, R. E., Cuddy, D. T., Jarnot, R. F., Knosp, B. W., Perun, V. S., Snyder, W. V., Stek, P. C., Thurstans, R. P., and Wagner, P. A.: Validation of Aura Microwave Limb Sounder stratospheric ozone measurements, *J. Geophys. Res.*, 113, D15S20, doi:10.1029/2007JD008771, 2008.
- Geer, A. J., Lahoz, W. A., Bekki, S., Bormann, N., Errera, Q., Eskes, H. J., Fonteyn, D., Jackson, D. R., Juckes, M. N., Massart, S., Peuch, V.-H., Rharmili, S., and Segers, A.: The ASSET inter-comparison of ozone analyses: method and first results, *Atmos. Chem. Phys.*, 6, 5445–5474, 2006.
- Huijnen, V., Williams, J., van Weele, M., van Noije, T., Krol, M., Dentener, F., Segers, A., Houweling, S., Peters, W., de Laat, J., Boersma, F., Bergamaschi, P., van Velthoven, P., Le Sager, P., Eskes, H., Alkemade, F., Scheele, R., Nédélec, P., and Pätz, H.-W.: The global chemistry transport model tm5: description and evaluation of the tropospheric chemistry version 3.0. *Geoscientific Model Development*, 3, 445–473, 2010.
- Lahoz, W. A., Errera, Q., Swinbank, R., and Fonteyn, D.: Data assimilation of stratospheric constituents: a review, *Atmos. Chem. Phys.*, 7, 5745–5773, 2007.
- Lahoz, W. A., Errera, Q., Viscardi, S., and Manney, G. L.: The 2009 stratospheric major warming described from synergistic use of BASCOE water vapour analyses and MLS observations, *Atmos. Chem. Phys.*, 11, 4689–4703, 2011.
- Levelt, P. F., van den Oord, G. H. J., Dobber, M. R., Malkki, A., Visser, H., de Vries, J., Stammes, P., Lundell, J. O. V., and Saari, H.: The Ozone Monitoring Instrument, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 44(5), 1093–1101, 2006.
- Liu, Z.-Q. and Rabier, F.: The potential of high-density observation for numerical weather prediction: A study with simulated observations, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 129, 3013–3035, 2003.
- Livesey, N. J., Filipiak, M. J., Froidevaux, L., Read, W. G., Lambert, A., Santee, M. L., Jiang, J. H., Pumphrey, H. C., Waters, J. W., Cofield, R. E., Cuddy, D. T., Daffer, W. H., Drouin, B. J., Fuller, R. A., Jarnot, R. F., Jiang, Y. B., Knosp, B. W., Li, Q. B., Perun, V. S., Schwartz, M. J., Snyder, W. V., Stek, P. C., Thurstans, R. P., Wagner, P. A., Avery, M., Browell, E. V., Cammas, J.-P., Christensen, L. E., Diskin, G. S., Gao, R.-S., Jost, H.-J., Loewenstein, M., Lopez, J. D., Nédélec, P., Osterman, G. B., Sachse, G. W., and Webster, C. R.: Validation of Aura Microwave Limb Sounder O₃ and CO observations in the upper troposphere and lower stratosphere, *J. Geophys. Res.*, 113, D15S02, doi:10.1029/2007JD008805, 2008.
- Logan, J. A.: An analysis of ozonesonde data for the troposphere: Recommendations for testing 3-D models and development of a gridded climatology for tropospheric ozone, *J. Geophys. Res.*, 104, 16, 115–149, 1999.
- Lorenc, A. C.: A global three-dimensional multivariate statistical interpolation scheme, *Mon. Weather Rev.*, 109, 701–721, 1981.
- Massart, S., Clerbaux, C., Cariolle, D., Piacentini, A., Turquety, S., and Hadji-Lazaro, J.: First steps towards the assimilation of IASI ozone data into the MOCAGE-PALM system, *Atmos. Chem. Phys.*, 9, 5073–5091, 2009.
- Massart, S., Piacentini, A. and Pannekoucke O.: Importance of using an ensemble estimated background error covariances for the quality of atmospheric ozone analyses, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, submission: March 2011.
- Pannekoucke, O. and Massart, S.: Estimation of the local diffusion tensor and normalization for heterogeneous correlation modelling using a diffusion equation, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 134, 1425–1438, doi:10.1002/qj.288, 2008.
- Peuch, V.-H.: MOCAGE, MODèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle, Acte des Ateliers de Modélisation de l’Atmosphère, 42, avenue Gaspard Coriolis, 31100 Toulouse, 33–36, 1999.
- Rotman, D. A., Tannahill J. R., Kinnison D. E., Connell, P. S., Bergmann, D., Proctor, D., Rodriguez, J. M., Lin, S. J., Rood, R. B., Prather, M. J., Rasch, P. J., Considine, D. B., Ramarosan, R., and Kawa, S. R.: Global Modeling Initiative assessment model: Model description, integration, and testing of the transport shell, *J. Geophys. Res.*, 106, 1669–1691, 2001.
- Scannell, C., Hurtmans, D., Boynard, A., Hadji-Lazaro, J., George, M., Delcloo, A., Tuinder, O., Coheur, P.-F., and Clerbaux, C.: A review of the ozone hole from 2008 to 2010 as observed by IASI, *Atmospheric Measurement Techniques Discussion*, 4, 4717–4752, 2011, www.atmos-meas-tech-discuss.net/4/4717/2011/.
- Smit, H. G. J., Strater, W., Helten, M., Kley, D., Ciupa, D., Claude, H. J., Kohler, U., Hoegger, B., Levrat, G., Johnson, B., Oltmans, S. J., Kerr, J. B., Tarasick, D. W., Davies, J., Shitamichi, M., Srivastav, S. K., Vialle, C., and Velghe, G.: JOSIE: The 1996 WMO International intercomparison of ozonesondes under quasi flight conditions in the environmental simulation chamber at Julich, in: *Proceedings of the XVIII Quadrennial Ozone Symposium*, edited by: Bojkov, R. and Visconti, G., L’Aquila, Italy, September 1996, 971–974, 1998.
- van der A, R. J., Allaart, M. A. F. and Eskes, H. J.: Multi sensor re-analysis of total ozone, *Atmos. Chem. Phys.*, 10, 11277–11294, 2010.
- Veefkind, J. P., de Haan, J. F., Brinksma, E. J., Kroon, M., and Levelt, P. F.: Total Ozone from the Ozone Monitoring Instrument (OMI) Using the DOAS technique, *Geoscience and Remote Sensing, IEEE Transactions on*, 44, 5, 1239–1244, doi:10.1109/TGRS.2006.871204, 2006.
- Weaver, A. and Courtier, P.: Correlation modelling on the sphere using a generalized diffusion equation, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 127, 1815–1846, 2001.

Cinquième partie

Perspectives

*Les hommes, même les scientifiques, ne peuvent s'empêcher d'espérer. Leurs
expectatives sont simplement plus précises.*
Karl A. Menninger, psychiatre américain.

Après avoir présenté le travail réalisé durant cette thèse dans les deux parties précédentes, il est maintenant temps d'évoquer les futurs axes de recherche envisageables pour le poursuivre et l'approfondir. Tout d'abord, la prise en compte optimale de l'information provenant de jeux d'observations à haute répartition spatiale constitue un aspect majeur ouvert par ce travail. L'effet de l'augmentation de la résolution de la grille sur laquelle les observations sont moyennées n'a pu être que partiellement évalué. D'une part parce que les résultats obtenus nécessitent d'être validés sur une période plus longue. Et d'autre part parce que l'information verticale contenue dans les observations assimilées n'a pas été totalement exploitée et que la portée horizontale de la correction peut être représentée de manière plus précise. Nous précisons ces trois aspects dans un premier chapitre ainsi que deux utilisations futures de ce travail, envisagée et envisageable.

Dans un second chapitre, nous nous intéressons à des aspects plus généraux de l'assimilation de données appliquée à la chimie atmosphérique. Nous décrivons deux aspects susceptibles d'améliorer les analyses issues de l'assimilation de données que sont la prise en compte des réactions chimiques dans le processus de minimisation et l'adoption d'un algorithme multi-échelles tel qu'évoqué précédemment. Cette seconde amélioration peut être couplée à l'utilisation d'un préconditionnement adaptatif pouvant conduire à une importante réduction du coût numérique de l'assimilation. Pour finir, nous évoquons la possibilité de développer un système d'assimilation en quasi temps réel et celle d'assimiler d'autres espèces chimiques.

Vers une prise en compte optimale de l'information des observations à haute répartition spatiale

Analyses sur une période plus longue

Les résultats présentés dans la partie IV concernent une étude réalisée sur le mois de septembre 2008. Il n'est donc pas acquis que ces résultats restent valables au cours d'autres saisons. Par exemple, la variabilité des colonnes totales d'ozone issues des analyses Ahh (*c.f.* le tableau IV.0.1 à la page 120), comparée aux réanalyses ERA-Interim et aux données OMI, est améliorée par rapport à celle des colonnes totales d'ozone issues des analyses Ahl dans la bande de latitude [90° S : 60° S]. Mais c'est aussi dans cette bande de latitude que la variabilité des colonnes totales est la plus forte, en conséquence de la dynamique du vortex polaire. Il est possible qu'en-dehors de cet événement particulier, sous l'hypothèse que l'on conserve la même configuration du système d'assimilation, aucune amélioration de la variabilité des colonnes totales ne persiste comme c'est le cas durant le mois de septembre 2008.

D'autre part, nous avons relié les différences obtenues dans les simulations directes de Mocale (en fonction de la résolution horizontale) avec une meilleure représentation de la dynamique verticale des forçages dans la configuration T170. Les phénomènes responsables de la dynamique atmosphérique (décrits dans la partie I à la page 20) n'étant pas constants tout au long de l'année, une étude sur une période plus longue permettrait de confirmer ce lien.

Aussi, le nombre de sondes d'ozone utilisées pour comparer les analyses est très faible : 48 profils seulement et aucun disponible dans la bande de latitude [60° N : 90° N] durant le mois de septembre 2008. En prolongeant les expériences sur plusieurs mois, on multiplierait le nombre de profils disponibles pour la comparaison et on obtiendrait des résultats plus significatifs sur la validité de la répartition verticale des analyses. Il est parfois nécessaire d'attendre pour que certaines données deviennent accessibles. Le délai peut par exemple être de 2 ans comme pour les données fournies par le *Network for the Detection of Atmospheric Composition Change* (NDACC).

Enfin, les écarts-types d'erreur d'ébauche proviennent de l'étude de MASSART *et al.* [71] où ils sont estimés d'après un ensemble d'assimilations. Supposant que les valeurs de ces écarts-types sont correctes relativement les unes aux autres, nous leur avons appliqué un coefficient correctif multiplicatif comme ceux basés sur les travaux de DESROZIERS *et al.* [23]. La cohérence globale du système, contrôlée à l'aide de diagnostics sur l'assimilation de données, s'est révélé

lée satisfaisante. Cependant, les écarts-types d'erreur d'ébauche sont sujets aux variations des phénomènes physiques et chimiques modélisés et, en conséquence, ils varient de mois en mois. Ainsi les corrections apportées au modèle par les observations peuvent avoir une répartition très différente, ce qui modifie les zones d'intérêt de l'analyse dans l'espace. De plus, les écarts-types d'erreur d'ébauche ont été diagnostiqués sur une grille régulière $2^\circ \times 2^\circ$ et ils peuvent donc être affinés.

Utilisation des *Averaging Kernels*

Le travail relaté dans la partie précédente met en avant le besoin d'avoir une source d'information sur la distribution verticale de l'ozone différente de IASI aussi dense que le jeu de données de colonnes totales assimilées. C'est habituellement le rôle des profils avec AK (*c.f.* section 4.2 de la partie I) que nous avons négligé dans cette thèse pour des raisons de coût numérique. En effet, leur prise en compte augmente le nombre d'opérations nécessaires à la projection du modèle dans l'espace des observations d'une part, et elle nécessite le stockage d'un nombre d'informations sur les observations bien supérieur.

Si l'on prend en compte les profils avec AK, le vecteur d'innovation \mathbf{d} (*c.f.* section 1.3.3 de la partie II page 54) pour une observation se réécrit : $\mathbf{d} = y^o - \mathcal{H}\mathbf{x}_0(t)$, où \mathcal{H} est un opérateur de projection différent de celui utilisé jusqu'à présent. Le vecteur \mathbf{x}_0 , que l'on peut appeler le profil lissé, est défini par :

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_{ap} + A(\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{ap}), \quad (\text{V.1.1})$$

où \mathbf{x}_{ap} est le vecteur *a priori*, constant, \mathbf{x}_m est l'équivalent du modèle dans "l'espace des AK" et A est la matrice des AK. \mathbf{x}_m est obtenu par l'application d'un second opérateur d'observation $\tilde{\mathcal{H}}$ sur le vecteur d'état \mathbf{x} du modèle : $\mathbf{x}_m = \tilde{\mathcal{H}}\mathbf{x}$. L'opérateur $\tilde{\mathcal{H}}$ projette le vecteur d'état sur les niveaux des AK.

L'inversion FORLI de IASI (*c.f.* l'article de la partie IV) fournit les AK sur 40 niveaux. En conséquence, la prise en compte de ces AK nécessite de stocker 40 données supplémentaires pour chaque observations IASI. Or nous travaillons déjà avec un nombre d'observations très élevé (de l'ordre de 150000 par jour pour les super-observations IASI sur grille T170). Sans considération de performance, la simple utilisation des AK nécessite donc d'apporter un grand soin à la gestion de la mémoire. Dans notre configuration, la solution pourra par exemple passer par le portage du système sur une machine de calcul dont les noeuds possèdent une plus grande capacité de stockage, par la parallélisation différente du code de Mocage (avec mémoire distribuée) ou bien encore par le développement d'un opérateur d'observation spécifique (parallèle par exemple).

Enfin, signalons que l'utilisation des AK soulève une question supplémentaire. En effet, comment transformer les données sur les observations contenues dans la matrice A en données utilisables pour les super-observations? Différentes méthodes, que nous ne développons pas, peuvent être envisagées pour y parvenir et elles devront être évaluées par l'utilisateur désireux d'obtenir une analyse de la meilleure qualité possible.

Longueurs de portée inhomogènes et anisotropes

L'opérateur de corrélation \mathbf{C} a pour effet de lisser spatialement la correction apportée au modèle d'un point de grille à l'autre (*c.f.* section 3.2.4 de la partie II page 69). On lui associe la longueur de portée L qui caractérise la longueur de l'étalement de cette correction. Dans notre étude, nous avons utilisé des longueurs de portée isotropes et homogènes pour la corrélation d'erreur d'ébauche car ainsi, l'opérateur de corrélation correspond dans l'espace spectral à la multiplication du vecteur de contrôle par une matrice diagonale dont l'expression est facilement

accessible. Cependant, la forme des structures des corrections apportées au modèle devrait dépendre des conditions physiques et chimiques locales, et donc de la position géographique de la correction. Par exemple, il est plus réaliste de fournir une forme allongée à la correction dans le sens du vent dominant. Il serait donc souhaitable d'utiliser des longueurs de portée anisotropes et inhomogènes lorsque c'est possible.

Des longueurs de portée horizontales appropriées peuvent être obtenues par des statistiques sur des ensembles d'états perturbés de manière aléatoire. Par exemple, dans MASSART *et al.* [71], les longueurs de portée sont diagnostiquées dans l'espace physique sur une grille 2° par 2° et peuvent ainsi être lues dans un fichier 3D. Cependant, les longueurs de portée diagnostiquées dépendent de la résolution du modèle et leur projection sur une grille de plus haute résolution dégrade leur qualité. Leur calcul sur une grille haute résolution par des méthodes d'ensemble deviendrait extrêmement coûteux. En conséquence, on peut envisager d'autres solutions comme par exemple diagnostiquer la longueur de portée en fonction de la vorticit  potentielle (ELBERN *et al.* [26]).

Impact de conditions limites haute r solution sur un mod le r gional

Nous venons d'introduire plusieurs axes de travail destin s   l'am lioration du processus d'assimilation de donn es. Mais quel que soit le raffinement apport    la m thode d'assimilation, le travail r alis  trouve un int r t suppl mentaire si on l'utilise pour la mod lisation r gionale. En effet, les conditions limites utilis es dans un cadre r gional proviennent d'un mod le global. Or les mod les r gionaux utilisent des r solutions horizontales bien plus fines que celles des mod les globaux. Les conditions limites du mod le global sont donc extrapol es   la r solution du mod le r gional. En cons quence, l'utilisation d'un mod le global de plus haute r solution permettrait de fournir des conditions limites contenant plus d'informations au mod le r gional. L'influence de la r solution horizontale des conditions limites fournies au mod le r gional sera  tudi e dans le cadre du nouveau projet europ en MACC-II.

Ozone troposph rique

Le travail r alis  dans cette th se s'est concentr  sur l'ozone stratosph rique. Nous avons utilis  le sch ma chimique lin aire Cariolle qui n glige un certain nombre de r actions ayant lieu dans la troposph re et mod lise les concentrations d'ozone des basses couches troposph riques par un rappel   la climatologie. L'utilisation d'un sch ma chimique plus complet, combin e avec l'assimilation de donn es troposph riques de haute r partition spatiale, am liorerait la repr sentation des champs d'ozone dans la troposph re. De plus, il pourrait  tre envisag  d'utiliser une version du MCT Mocage avec une plus haute r solution verticale comportant 91 niveaux de pressions   la place des 60 niveaux de la version utilis e dans cette th se. En effet, nous avons vu que l'augmentation de la r solution horizontale permet une meilleure repr sentation des vitesses verticales dans les for ages et am liore ainsi les simulations d'ozone. Le raffinement du maillage vertical pourrait  galement am liorer la repr sentation de ces vitesses verticales et, en cons quence, les simulations d'ozone.

2

Vers un perfectionnement du processus d'assimilation de données

Introduction de la chimie dans le processus de minimisation

Avec la méthode 4D-Var incrémentale, on utilise une version simplifiée du modèle de propagation lors du processus de minimisation. En l'occurrence dans notre étude, nous avons négligé la prise en compte des phénomènes chimiques. Bien que ceci augmente le coût du processus de minimisation, la qualité des analyses en serait probablement améliorée dans les zones où la durée de vie chimique est faible comparée à la durée de vie dynamique de l'espèce étudiée. À ce propos, l'adjoint du schéma linéaire Cariolle est déjà implémenté dans Valentina et les effets de la chimie dans le processus de minimisation doivent maintenant être évalués, ce qui représente une perspective intéressante de développement de l'assimilation de données.

Algorithme multi-échelles

Il était initialement prévu dans ce travail de thèse d'utiliser l'algorithme multi-échelles tel que décrit dans la partie III. Basé sur l'algorithme de la boucle externe, il consiste à utiliser un modèle linéaire simplifié avec une résolution croissante à chaque itération de la boucle externe. Son utilisation devrait réduire le coût de l'assimilation de données. En effet, les structures de grande échelle devraient être générées lors des premières boucles externes et le nombre d'itérations du processus de minimisation lors de la dernière boucle externe, utilisant le modèle à la plus haute résolution, devrait donc être réduit. De plus, dans le cas que nous avons étudié, où le processus de minimisation de l'assimilation ne prend pas en compte les phénomènes chimiques, il permettrait d'intégrer ces phénomènes dans le calcul de l'analyse par repropagation du modèle complet à chaque itération de la boucle externe. Dans le cas où la chimie aurait été introduite dans le processus de minimisation, cet intérêt demeurerait lorsque l'on utilise un schéma chimique plus complet que le schéma linéaire Cariolle. D'autre part, rappelons que la boucle externe conserve l'avantage d'intégrer des observations pertinentes dans l'assimilation alors qu'elles peuvent avoir été rejetées à cause d'une première estimation du champ étudié trop éloignée de ces observations.

Préconditionnement adaptatif

En complément de l'utilisation de l'algorithme de la boucle externe, il est envisagé d'utiliser un préconditionneur adaptatif dans le but de diminuer le nombre d'itérations nécessaires à l'obtention de l'analyse. Si dans notre étude, nous avons utilisé un vecteur de contrôle exprimé

dans l'espace spectral, nous aurions également pu effectuer un changement de variable afin de définir un nouveau problème de minimisation et un nouveau vecteur de contrôle. Dans le cas où le nouveau problème de minimisation est "mieux" conditionné, le nombre d'itérations diminue et les opérateurs appliqués à l'ancienne variable de contrôle prennent le nom de préconditionneur. Le préconditionneur peut être recalculé d'une itération de la boucle externe à l'autre, permettant ainsi de conserver la direction de descente de l'algorithme de minimisation calculé lors de l'itération de la boucle externe précédente. De plus, l'expression du conditionneur dans l'espace spectral diminue le coût de son calcul d'une boucle externe à l'autre, ce qui en fait une méthode particulièrement bien adaptée à notre système.

Assimilation en quasi-temps réel

On qualifie un système d'assimilation de données en chimie atmosphérique d'opérationnel lorsque celui-ci est utilisé pour analyser des épisodes présents dans le but de réaliser des prévisions des concentrations des gaz trace dans l'atmosphère. Le système d'assimilation Valentina avec Mocale est déjà opérationnel pour la prévision régionale de l'ozone de surface sur l'Europe (MACC). Le rendre opérationnel en version globale, comme d'autres systèmes d'assimilation basés sur des MCT globaux le sont, est envisageable. Déjà parce l'analyse de l'ozone durant une journée, même avec un modèle haute résolution T170 et le grand nombre de super-observations de IASI, est suffisamment courte pour que la prévision conserve un intérêt. Et aussi parce que la surveillance de l'environnement terrestre est assurée par un nombre grandissant d'instruments à bord de satellites à vocation opérationnelle. On dispose notamment des mesures en quasi-temps réel (décalage de quelques jours) issues des mesures *in-situ* des avions du programme IAGOS et des instruments SCIAMACHY (satellite Envisat), MLS (UARS), OMI (Aura) et IASI (Metop-A).

Les prévisions que l'on réaliserait pourraient alors servir, par exemple, à anticiper la formation du trou de la couche d'ozone et cette information serait plus précise avec un modèle à plus haute résolution et une meilleure prise en compte des informations des observations à haute répartition spatiale. Mais s'il s'avère que l'augmentation de la résolution des conditions limites fournies par une analyse globale à un modèle régional a un impact positif, alors la prévision en quasi-temps réel de Valentina trouve un intérêt supplémentaire dans le cadre de la prévision en pollution atmosphérique. Bien sûr, un système opérationnel, tel que ceux utilisés en météorologie, utilise le plus grand nombre possible d'observations afin d'améliorer les analyses des espèces chimiques. En ce sens, Valentina resterait à adapter informatiquement.

Assimilation d'autres espèces chimiques

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à l'ozone et nous avons utilisé le schéma chimique linéaire d'ozone Cariolle. Utiliser un schéma chimique plus complet pour la prévision d'un cycle à l'autre (et non pour l'assimilation de données) permettrait de modifier les concentrations des espèces chimiquement liées à l'ozone. D'autre part, nous pourrions exploiter l'information de petite échelle contenue dans les observations d'espèces chimiques différentes, comme par exemple le monoxyde de carbone, essentiellement présent dans la troposphère et disponible comme produit IASI. En l'occurrence, le schéma chimique linéaire du monoxyde de carbone existe et est validé dans CLAEYMAN *et al.* [14]. Il est actuellement utilisé au CEPMMT, couplé au modèle de prévision IFS. Pour assimiler d'autres espèces chimiques, le schéma chimique linéaire et son adjoint resteront à développer. Alternativement, ces espèces pourraient être assimilées sans considération de leur chimie dans le processus d'assimilation.

Conclusions

Ce n'est pas la fin. Ce n'est même pas le commencement de la fin. Mais, c'est peut-être la fin du commencement.

Extrait d'un discours (10 novembre 1942) de Winston Churchill, homme d'état anglais.

Le travail effectué tout au long de cette thèse s'inscrit dans le cadre de l'étude de la distribution de l'ozone stratosphérique. En conséquence, nous avons dans une première partie fourni les notions de chimie atmosphérique, utiles à la compréhension de sa distribution, concernant notamment la composition de l'atmosphère, sa dynamique et la chimie de l'ozone stratosphérique. Nous avons également introduit la chimie atmosphérique vue depuis l'espace et les caractéristiques des mesures que nous avons assimilées, issues des instruments IASI et MLS. En effet, de nos jours, l'étude de la distribution de l'ozone stratosphérique s'appuie sur des outils numériques, dont l'assimilation de données, que nous avons décrit dans la deuxième partie de cette thèse. Nous avons notamment explicité la modélisation de la chimie atmosphérique au sein du modèle de chimie-transport Mocage et les bases du système d'assimilation de données Valentina.

Notre objectif est d'améliorer la représentation de la distribution de l'ozone stratosphérique par le biais de l'exploitation optimale de la répartition spatiale des observations. Dans ce but, nous avons choisi d'augmenter la résolution horizontale du modèle Mocage. Cette augmentation étant coûteuse, j'ai implémenté la résolution du problème d'assimilation de données dans l'espace spectral afin de travailler avec un vecteur de contrôle de dimension inférieure. J'ai également testé le couplage de l'algorithme de la boucle externe et de la méthode variationnelle 3D-FGAT en assimilant les profils d'ozone issus de l'instrument MLS à l'aide du système Valentina, tel que relaté dans la troisième partie. Il en résulte que cette combinaison peut dégrader les analyses du champ d'ozone dans le cas de situations atmosphériques dominées par le transport telles que rencontrées dans la stratosphère au-dessus du pôle sud à la fin de l'hiver austral. Ce constat nous a incité à écrire un article à propos du comportement du système d'assimilation de données dans une telle configuration qui a été publié au journal *Monthly Weather Review*. Dans la suite, nous avons utilisé la méthode variationnelle 4D-Var en terme d'incrément car cette méthode considère la dynamique lors du processus de minimisation de l'assimilation.

Les colonnes totales d'ozone issues de l'instrument IASI possédant une haute répartition spatiale, nous les avons choisi pour être assimilées. En effet, la taille de leur pixel étant bien inférieure à la résolution horizontale couramment utilisée avec Mocage, ces données sont moyennées en super-observations sur une cellule du modèle avant d'être assimilées à l'aide de Valentina. Et pour diminuer la perte d'information intrinsèque à cette moyenne, nous avons augmenté la résolution de Mocage. Ainsi, nous avons généré deux jeux de super-observations, que nous avons appelé IASI T42 et IASI T170, respectivement moyennées sur les grilles Gaussiennes T42 et T170. Afin de contraindre la répartition verticale de l'information dans la stratosphère et

haute troposphère à moindre coût, les AK de IASI ont été négligés et les deux jeux de super-observations IASI générés ont été combinés aux profils d’ozone issus de l’instrument MLS, ainsi appelés IASI T42 & MLS et IASI T170 & MLS. Dans la quatrième partie, nous avons dans un premier temps étudié l’effet de l’augmentation de la résolution horizontale de Mocage, sans et avec assimilation des données IASI T42 & MLS, et ensuite les effets du passage de l’assimilation du jeu de données IASI T42 & MLS à celle du jeu de données IASI T170 & MLS.

Les simulations directes ont montré que l’augmentation de la résolution horizontale modifie les structures d’ozone de petite et de grande échelles et améliore la représentation du champ d’ozone. Les analyses du jeu de données IASI T42 & MLS, comparées aux réanalyses ERA-Interim, aux données OMI et à des sondes d’ozone, sont aussi améliorées, mais dans une moindre mesure, par l’augmentation de la résolution horizontale. Si, par rapport à l’assimilation des données IASI T42 & MLS, celle des données IASI T170 & MLS a amélioré la variabilité des colonnes totales d’ozone comparée aux réanalyses ERA-Interim et aux données OMI dans la bande de latitude [90° S : 60° S], elle a en revanche dégradé l’accord des analyses avec les sondes d’ozone ainsi que la représentation du gradient horizontal des concentrations d’ozone à la frontière du vortex polaire à certains niveaux de pression. Nous en avons conclu qu’il était nécessaire d’avoir une source d’information sur la distribution verticale de l’ozone aussi dense que le jeu de données de colonnes totales assimilées.

En résumé, ce travail de thèse a permis de mettre en avant qu’il était possible d’extraire l’information des instruments à haute répartition spatiale par le biais de l’augmentation de la résolution horizontale du modèle et quels efforts de développements restent à fournir pour assimiler cette information de manière optimale. Comme nous l’exposons dans la cinquième partie, les résultats de l’assimilation de données seraient probablement améliorés par l’utilisation des AK de IASI ainsi que celle de longueurs de portée de la corrélation horizontale inhomogènes et anisotropes. D’autre part, il serait souhaitable de procéder à une analyse sur une période plus longue afin de confirmer certains phénomènes ainsi que la persistance des résultats en d’autres saisons. Quoi qu’il en soit, le travail réalisé dans cette thèse sera utilisé dans le cadre du projet européen MACC afin d’évaluer l’influence de la résolution horizontale des conditions limites fournies à un modèle régional.

La qualité de nos analyses pourrait également être améliorée par un perfectionnement du processus d’assimilation de manière plus globale. Notamment, les études présentées dans cette thèse négligent la chimie dans le processus de minimisation de l’assimilation. Cette possibilité est dorénavant implémentée au sein de Valentina et nécessite d’être évaluée. L’algorithme multi-échelles, dont l’utilisation était initialement envisagée avec le 3D-FGAT, pourrait également améliorer la représentation du champ d’ozone, et son coût d’exécution serait grandement réduit si un préconditionnement adaptatif était parallèlement utilisé. Enfin, notons que le système d’assimilation de données Valentina avec Mocage pourrait être rendu opérationnel en version globale. Ainsi, s’il s’avère que l’augmentation de la résolution des conditions limites fournies par une analyse globale à un modèle régional a un impact positif, alors la prévision en quasi-temps réel de Valentina servira dans le cadre de la prévision en pollution atmosphérique.

Sixième partie

Annexes

A

Introduction aux méthodes stochastiques

En supposant que l'opérateur d'observation \mathbf{H}_k au temps t_k et le modèle \mathbf{M}_k , propageant le vecteur d'état du temps t_k au temps t_{k+1} , sont linéaires, l'estimation linéaire statistique permet de déterminer la meilleure estimation bayésienne (TALAGRAND [90]) de l'état réel (BLUE), $\mathbf{x}^a(t_k)$, sous la forme d'une combinaison linéaire de l'ébauche $\mathbf{x}^b(t_k)$ et de l'observation $\mathbf{y}^0(t_k)$ à chaque instant t_k :

$$\mathbf{x}^a(t_k) = \mathbf{x}^b(t_k) + \mathbf{K}_k[\mathbf{y}^0(t_k) - \mathbf{H}_k\mathbf{x}^b(t_k)], \quad (\text{VI.A.1})$$

avec la matrice de gain de Kalman :

$$\mathbf{K}_k = \mathbf{B}_k\mathbf{H}_k^T(\mathbf{H}_k\mathbf{B}_k\mathbf{H}_k^T + \mathbf{R}_k)^{-1}. \quad (\text{VI.A.2})$$

\mathbf{B}_k et \mathbf{R}_k sont les matrices de covariance d'erreur d'ébauche et d'observation au temps t_k . Le BLUE correspond à l'analyse dont la variance d'erreur est minimale.

La matrice de covariance d'erreur d'analyse à l'instant t_k est donnée par l'équation suivante :

$$\mathbf{A}_k = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_k\mathbf{H}_k)\mathbf{B}_k. \quad (\text{VI.A.3})$$

L'état du système $\mathbf{x}(t_{k+1})$ au temps t_{k+1} est lié à son homologue $\mathbf{x}(t_k)$ au temps t_k par la formule suivante :

$$\mathbf{x}(t_{k+1}) = \mathbf{M}_k[\mathbf{x}(t_k)] + \eta_k, \quad (\text{VI.A.4})$$

où η_k représente l'erreur du modèle. Ainsi, une fois l'estimation $\mathbf{x}^a(t_k)$ réalisée au temps t_k , le modèle linéaire \mathbf{M}_k est appliqué pour obtenir l'état prévu $\mathbf{x}^b(t_{k+1})$ au temps au temps t_{k+1} à l'aide de la formule suivante :

$$\mathbf{x}^b(t_{k+1}) = \mathbf{M}_k[\mathbf{x}^a(t_k)]. \quad (\text{VI.A.5})$$

Cette approche de l'assimilation de données permet de mettre à jour à intervalles réguliers l'estimation de l'état de l'atmosphère fournie par le modèle à l'aide des nouvelles observations disponibles. Elle est généralement constituée d'un cycle d'analyses objectives tridimensionnelles purement spatiales et de prévisions à court terme. Les variables du modèle sont ajustées quand une observation est disponible, sans rétroaction vers le passé (contrairement à l'approche 4D-Var). Au pas de temps suivant, ces estimations *a posteriori* fournissent les nouvelles conditions initiales du modèle.

L'approche que nous venons de décrire est connue sous le nom d'Interpolation Optimale (IO) dans le cas où les covariances d'erreur d'ébauche restent inchangées au cours du temps (LORENC

[63]). Dans le cas simple où les erreurs η_k du modèle \mathbf{M}_k sont supposées nulles, la méthode variationnelle classique 3D-Var (COURTIER *et al.* [16]) constitue une forme améliorée de l'IO puisqu'elle assimile les observations simultanément dans une fenêtre temporelle. À la différence de l'approche purement matricielle de l'IO, la technique 3D-Var consiste à minimiser une fonction coût \mathbf{J} qui mesure la distance à l'ébauche et aux observations disponibles au voisinage du temps t_k :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{x}(t_k)) &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}(t_k) - \mathbf{x}^b(t_k))^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}(t_k) - \mathbf{x}^b(t_k)) \\ &+ \frac{1}{2}[\mathcal{H}_k[\mathbf{x}(t_k)] - \mathbf{y}_k^o]^T \mathbf{R}_k^{-1}[\mathcal{H}_k[\mathbf{x}(t_k)] - \mathbf{y}_k^o]. \end{aligned} \quad (\text{VI.A.6})$$

En utilisant la formule de Sherman-Morrison-Woodbury :

$$\mathbf{K}_k = (\mathbf{B}_k^{-1} + \mathbf{H}_k^T \mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{H}_k)^{-1} \mathbf{H}_k^T \mathbf{R}_k^{-1}, \quad (\text{VI.A.7})$$

il est facile de vérifier que l'analyse $\mathbf{x}^a(t_k)$ de l'EQ. VI.A.1 correspond aussi au minimum de l'EQ. VI.A.6 de forme quadratique.

Une autre forme de l'IO est le filtre de Kalman (KALMAN [50]). L'idée est de transporter dans le temps, en plus de l'état du système, sa matrice de covariance d'erreur d'ébauche. La matrice \mathbf{B}_{k+1} de covariance d'erreur d'ébauche à l'instant t_{k+1} est déduite de celle de l'analyse \mathbf{A}_k à l'instant t_k à travers l'équation d'évolution temporelle suivante :

$$\mathbf{B}_{kk+1} = \mathbf{M} \mathbf{A}_k \mathbf{M}^T + \mathbf{Q}_k, \quad (\text{VI.A.8})$$

où \mathbf{Q}_k représente la matrice de covariance d'erreur du modèle.

Ainsi la valeur de l'ajustement est estimée en fonction des erreurs de prévision et de celles sur la mesure à l'instant de l'assimilation. L'estimation recherchée correspond à l'état dont la variance de l'erreur est minimale. Les matrices de covariance d'erreur de prévision sont propagées au cours du temps. La formulation du filtre de Kalman prend en compte les erreurs du modèle \mathbf{M} ainsi que leurs covariances. On parle ainsi d'une assimilation à contrainte faible, en opposition à l'approche 4D-Var qui considère le modèle comme étant parfait (contrainte forte). Néanmoins, la représentation et la propagation des erreurs liées au modèle est une étape numériquement fort coûteuse et donc limitante des algorithmes du filtre de Kalman car il dépasse rapidement les moyens de calcul disponibles quand la dimension du vecteur d'état est élevée. En pratique, le calcul de la matrice \mathbf{B}_{k+1} de l'EQ. VI.A.8 est remplacé par la multiplication de la variance de l'analyse par un coefficient déterminé par l'expérience des assimilations passées.

Le filtre de Kalman d'Ensemble permet l'économie de la propagation de la matrice de covariance d'erreur du modèle en l'estimant statistiquement via la méthode d'ensemble (EVENSEN [28], HOUTEKAMER *et al.* [44]). Cette méthode intègre le système plusieurs fois sur la même période avec des conditions initiales perturbées selon une loi de distribution gaussienne (méthode de Monte Carlo). Les différences entre les ébauches des différents membres permettent d'obtenir des substituts aux échantillons de l'erreur d'ébauche.

La méthode du filtre de Kalman suppose que les opérateurs d'observation et le modèle sont linéaires. Dans le cas non-linéaire, on peut utiliser une autre variante de cette méthode, appelée le filtre de Kalman étendu. Si l'écart entre l'ébauche et l'état vrai du système est faible, alors on remplace l'opérateur modèle et l'opérateur d'observation par leur linéaire tangent. Comme les modèles chimiques ou météorologiques sont, par définition, non-linéaires, le filtre de Kalman étendu ne pourra être appliqué que pour des intervalles de temps suffisamment courts pour que les hypothèses de linéarisation au premier ordre des opérateurs en question soient valables.

B

Normalisation dans le cas isotrope homogène

Cette annexe est construite sur la base des développements fournis par PANNEKOUCKE ET MASSART [77]. Tout lecteur souhaitant approfondir cet aspect ou sortir du cadre des longueurs de portée isotropes et homogènes est invité à consulter cette publication.

Considérons la forme générale de l'équation de diffusion appliquée à une variable η :

$$\partial_t \eta = \nabla \cdot (\boldsymbol{\nu} \nabla \eta), \quad (\text{VI.B.1})$$

où $\boldsymbol{\nu}$ est le tenseur de diffusion local. Dans le plan réel \mathbb{R}^2 , on note $\mathbf{x} = (x, y)$ un point et le tenseur local peut se développer en :

$$\boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \nu_x(\mathbf{x}) & \nu_{x,y}(\mathbf{x}) \\ \nu_{x,y}(\mathbf{x}) & \nu_y(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (\text{VI.B.2})$$

Comme nous sommes dans le cas d'une diffusion avec longueurs de portée homogènes, $\boldsymbol{\nu}$ est indépendant de \mathbf{x} . D'autre part, comme les longueurs de portée sont isotropes, on a : $\nu_x = \nu_y = \nu$ et $\nu_{x,y} = 0$. Ainsi, dans notre cas, on peut réécrire $\boldsymbol{\nu}$:

$$\boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \nu & 0 \\ 0 & \nu \end{pmatrix}. \quad (\text{VI.B.3})$$

Le terme de normalisation $\boldsymbol{\Lambda}$, qui assure que la matrice de corrélation d'erreur d'ébauche \mathbf{C} est normalisée, s'écrit quant à lui :

$$\boldsymbol{\Lambda}^2 = 2\pi |\boldsymbol{\Gamma}|^{1/2} \mathbf{I}, \quad (\text{VI.B.4})$$

où $|\boldsymbol{\Gamma}|$ est le déterminant de $\boldsymbol{\Gamma}$, \mathbf{I} est la matrice identité et $\boldsymbol{\Gamma}$ est définie dans notre cas comme suit :

$$\boldsymbol{\Gamma} = \begin{pmatrix} L^2 & 0 \\ 0 & L^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{VI.B.5})$$

avec L correspondant à la longueur de portée homogène (DALEY [21]).

En calculant ce déterminant, nous obtenons la formule de la matrice $\boldsymbol{\Lambda}$ pour notre cas :

$$\boldsymbol{\Lambda}^2 = 2\pi L^2 \mathbf{I}. \quad (\text{VI.B.6})$$

L peut être exprimée en m ou en km suivant le choix des unités dans l'Eq. VI.B.1. On peut aussi choisir d'exprimer L en ° à l'équateur et alors :

$$L = 2a \sin(L^\circ/2), \quad (\text{VI.B.7})$$

où a est le rayon terrestre (fixé à 6371.220 km dans Valentina) et L° est la longueur de portée horizontale en degrés.

C

Résolution de l'équation de diffusion en spectral

Toute personne voulant approfondir cet aspect de l'assimilation de données est invitée à consulter les publications de WEAVER ET COURTIER [103] et MIROUZE ET WEAVER [73] sur lesquelles s'appuie cette annexe.

Considérons l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} - \kappa \nabla^2 \eta = 0, \quad (\text{VI.C.1})$$

où ∇^2 est l'opérateur Laplacien défini sur la sphère et κ le coefficient constant de diffusion. Un champ scalaire $\eta(\theta, \phi, t)$ peut se développer en :

$$\eta(\theta, \phi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \eta_n^m(t) Y_n^m(\theta, \phi), \quad (\text{VI.C.2})$$

où θ est la longitude, ϕ est la latitude, m est le nombre d'onde zonal, n est le nombre d'onde total, $Y_n^m(\theta, \phi)$ sont les harmoniques sphériques et $\eta_n^m(t)$ sont les coefficients spectraux (*c.f.* section 1.1 de la partie III).

En remplaçant cette expression dans l'équation de diffusion et en remarquant que les harmoniques sphériques sont les vecteurs propres de l'opérateur Laplacien sur la sphère, avec $-n(n+1)/a^2$ les valeurs propres associées, on obtient que :

$$\frac{d\eta_n^m}{dt} = -\kappa \frac{n(n+1)}{a^2} \eta_n^m, \quad (\text{VI.C.3})$$

où a est le rayon terrestre (fixé à 6371.220 km dans Valentina). Ce qui s'intègre sur l'intervalle $[0, T]$ en :

$$\eta_n^m(T) = \eta_n^m(0) \exp \left\{ -\kappa T n(n+1)/a^2 \right\}, \quad (\text{VI.C.4})$$

où T est le temps total d'intégration.

Cette équation nous permet de définir la matrice de diffusion dans l'espace spectral :

$$\mathbf{L}_s = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_s^{a_1} & & & 0 \\ & \mathbf{L}_s^{a_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \mathbf{L}_s^{b_{nlat}} \end{bmatrix}, \quad (\text{VI.C.5})$$

où, $\forall 1 \leq j \leq nlat, 1 \leq j' \leq nlat$, on a :

$$\mathbf{L}_s^{a_j} = \mathbf{L}_s^{b_{j'}} = \begin{bmatrix} e^{\{-\kappa T * 0 * 1 * / a^2\}} & & & & 0 \\ & e^{\{-\kappa T * 1 * 2 * / a^2\}} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & e^{\{-\kappa T * (nlat - 1) nlat * / a^2\}} \end{bmatrix}. \quad (\text{VI.C.6})$$

D

Écriture de la fonction coût de l'ébauche dans l'espace spectral

Dans la section 1.3, nous avons obtenu l'écriture suivante de la fonction coût d'ébauche \mathbf{J}_b :

$$\mathbf{J}_b = \frac{1}{2} \delta \mathbf{x}_g^T \Sigma^{-1} \Lambda^{-1} \mathbf{L}^{-\frac{T}{2}} \mathbf{W}_g \mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g. \quad (\text{VI.D.1})$$

Étant donné que $\delta \mathbf{x}_g^T \Sigma^{-1} \Lambda^{-1} \mathbf{L}^{-\frac{T}{2}} = [\mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g]^T$, l'EQ. VI.D.1 peut être réécrite :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_b &= \frac{1}{2} [\mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g]^T \mathbf{W}_g [\mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g] \\ &= \frac{1}{2} \langle \mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g, \mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g \rangle_g. \end{aligned} \quad (\text{VI.D.2})$$

Comme $\mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g$ s'exprime également sur grille Gaussienne, nous utilisons l'EQ. III.1.14 reliant les produits scalaires gaussien et spectral pour réécrire l'EQ. VI.D.2 :

$$\mathbf{J}_b = \frac{1}{2} [\mathbf{A} \mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g]^T \mathbf{W}_s [\mathbf{A} \mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g]. \quad (\text{VI.D.3})$$

La matrice \mathbf{W}_s étant diagonale positive, elle se décompose facilement en $\mathbf{W}_s^{\frac{T}{2}} \mathbf{W}_s^{\frac{1}{2}}$. On peut développer l'EQ. VI.D.3 en :

$$\mathbf{J}_b = \frac{1}{2} [\mathbf{W}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g]^T [\mathbf{W}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g].$$

On rappelle l'expression de l'opérateur de diffusion \mathbf{L} dans l'espace spectral :

$$\mathbf{L} = \mathbf{S} \mathbf{L}_s \mathbf{A}. \quad (\text{VI.D.4})$$

Soit $\mathbf{L}^{\frac{1}{2}}$ la diffusion sur la moitié de l'intervalle pseudo-temporel utilisé pour \mathbf{L} . La relation de l'EQ. VI.D.4 s'applique indifféremment à $\mathbf{L}^{\frac{1}{2}}$:

$$\mathbf{L}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{S} \mathbf{L}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{A}. \quad (\text{VI.D.5})$$

En inversant l'EQ. VI.D.5 et en lui appliquant \mathbf{A} , nous obtenons :

$$\mathbf{A} \mathbf{L}^{-\frac{1}{2}} = \mathbf{L}_s^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A}. \quad (\text{VI.D.6})$$

Finalement, en y injectant l'EQ. VI.D.6, \mathbf{J}_b se réécrit :

$$\mathbf{J}_b = \frac{1}{2} [\mathbf{W}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{L}_s^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g]^T [\mathbf{W}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{L}_s^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \Lambda^{-1} \Sigma^{-1} \delta \mathbf{x}_g]. \quad (\text{VI.D.7})$$

C'est cette égalité que nous utilisons pour le calcul de la fonction coût dans l'espace spectral.

Table des figures

I.1.1	Principaux processus de la chimie atmosphérique	10
I.1.2	Composition chimique atmosphérique	11
I.1.3	Structure thermique verticale moyenne de l'atmosphère	13
I.1.4	Distribution verticale des principales espèces gazeuses	14
I.1.5	Spectre électromagnétique	15
I.1.6	Temps de vie photochimique de la famille O_x	17
I.1.7	Temps caractéristiques moyens de transport	18
I.2.1	Coupe verticale de la température en moyenne mensuelle et zonale	20
I.2.2	Coupe latitude-pression du vent zonal en moyenne mensuelle et zonale	21
I.2.3	Circulation de Brewer-Dobson	21
I.2.4	Illustration schématique des processus dynamiques de la haute troposphère - basse stratosphère	23
I.3.1	Colonne totale d'ozone en fonction de la latitude et du mois	26
I.3.2	Moyennes zonales du rapport de mélange d'ozone en janvier et en juillet	27
I.3.3	Températures minimales à 50 hPa observées en Arctique et en Antarctique sur la période 1978-2001	31
I.4.1	Sondages avec visée au nadir et au limbe	34
I.4.2	Averaging Kernels "parfait" et typique	35
I.4.3	Averaging Kernels de MLS	36
I.4.4	Couverture spatiale des profils MLS réalisés sur une journée	37
I.4.5	Colonnes totales d'ozone mesurées par IASI sur une journée	38
I.4.6	Averaging Kernels de IASI	38
II.1.1	Principe de l'optimisation de la condition initiale	46
II.1.2	Analyse de Cressman mono-dimensionnelle	51
II.1.3	Principe de l'optimisation de la condition initiale avec le formalisme de l'assimi- lation de données	53
II.1.4	Cycle d'assimilation 4D-Var	55
II.2.1	Principaux processus mis en jeu dans les MCT	60
II.2.2	Les 60 niveaux verticaux de MOCAGE	61
II.3.1	Capture d'écran PrePalm	67
II.3.2	Moyenne zonale des écarts-types d'erreur d'ébauche	69
III.0.3	Illustration de la stratégie multi-échelles	78

III.1.1	Système de coordonnées sphériques	82
III.1.2	Fonctions-vecteurs harmoniques sphériques Y_n^m	82
III.2.1	Illustration de la boucle externe	91
III.3.1	Incrément pour 2 itérations de la boucle externe	95
III.3.2	Biais et écarts-types (en %) par rapport aux observations <i>Aura</i> /MLS assimilées dans la bande de latitude [60° N : 90° N] pour les cas avec 2, 3 et 5 itérations de la boucle externe	96
III.3.3	Biais et écarts-types (en %) par rapport aux observations <i>Aura</i> /MLS assimilées dans la bande de latitude [90° S : 60° S] pour les cas avec 2 et 3 itérations de la boucle externe	97
III.3.4	Intensité des vents sur le mois d'août 2007	98
III.3.5	Illustration du transport de l'incrément	98
III.3.6	Incréments de colonnes totales d'ozone avec 3 itérations de la boucle externe	99

Liste des tableaux

I.4.1	Nombre moyen de colonnes totales IASI et de profils MLS produits par jour et par bande de latitude	37
II.3.1	Moyenne globale des estimations mensuelles de Σ en %	69
IV.0.1	Description des expériences de la partie IV	120

Glossaire

La première qualité du style, c'est la clarté.

Aristote, philosophe grec.

3D-FGAT : Méthode variationnelle tri-dimensionnelle avec *First Guess at Appropriate Time*

4D-Var : Méthode variationnelle quadri-dimensionnelle

ADOMOCA : Assimilation de DONnées par les MODèles de Chimie de l'Atmosphère

ARPEGE : Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle

ASSET : ASSimilation of *Envisat* Data

Bascoe : Belgian Assimilation System for Chemical ObsErvations

BIRA : Belgian Institute for Space Aeronomy

BLUE : Best Linear Unbiased Estimation

CEPMMT : Centre Européen de Prévisions Météorologiques à Moyen Terme

CEREA : Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique

CNRM : Centre National de Recherches Météorologiques

COV : Composés Organiques Volatils

DU : Dobson Unit

GMI : Global Modeling Initiative

IASI : Infrared Atmospheric Sounding Interferometer

IFS : Integrated Forecast System

IO : Interpolation Optimale

IPSL : Insitut Pierre-Simon Laplace

IR : Infra Rouge

KNMI : Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut, service national de météorologie des Pays-Bas

LA : Laboratoire d'Aérologie

MACC : Monitoring Atmospheric Composition and Climate

MCG : Modèle de circulation générale

MCT : Modèles de chimie-transport

MLS : Microwave Limb Sounder

Mobidic : MOdèle BIDimensionnel de Chimie

Mocage : MOdèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle

NASA : National Aeronautics and Space Administration

NCAR : National Center for Atmospheric Research

NDACC : Network for the Detection of Atmospheric Composition Change

Palm : Projet d'Assimilation par Logiciel Multi-méthodes

ppb : parts per billion

ppmv : parts per million

ppt : parts per trillion

PSC : Polar Stratospheric Cloud

RACM : Regional Atmospheric Chemistry Mechanism

RACMOBUS : RACM + REPROBUS

RELACS : Regional Lumped Atmospheric Chemical Scheme

REPROBUS : Reactive Processes Ruling the Ozone Budget in the Stratosphere

UTLS : Upper Troposphere - Lower Stratosphere

UV : Ultra Violet

Valentina : Nom du système d'assimilation de données employé

Index

Quelle utilité peuvent avoir les mots si nous ne les utilisons pas avec précision ?
Extrait de *Un thé sur le divan bleu*, Natasha Illum Berg, écrivain et chasseuse.

- Écriture de la fonction coût de l'ébauche dans l'espace spectral, 161
Aura/MLS, 36
Metop-A/IASI, 37
3D-FGAT, 57
4D-Var, 54
4D-Var incrémental, 56
- Adoption du 4D-Var, 115
Assimilation de données, 45
Avantages et défauts de la boucle externe combinée au 3D-FGAT, 93
- Boucle externe, 89
- Coefficients correctifs avec boucle externe, 91
Coefficients correctifs pour matrices de covariance d'erreur, 71
Caractéristiques des mesures chimiques satellitaires, 33
Chimie atmosphérique, 7
Chimie de l'équilibre naturel de l'ozone stratosphérique, 28
Composition chimique de l'atmosphère, 10
Covariances d'erreur, 52
Cressman, 50
- Décomposition de \mathbf{B} en spectral, 85
Définition des harmoniques sphériques, 81
- Espaces physique et spectral d'expression du champ, 83
- Fonction coût en spectral, 85
- Gaz à effet de serre, 11
Gaz réactifs, 11
Gradient de la fonction coût en spectral, 87
- Haute résolution, 119
Innovation, 48
Méthodes stochastiques, 155
Méthodes variationnelles, 54
Mise en place du système d'analyse haute résolution, 77
Mocage, 59, 60
Modélisation de \mathbf{B} , 66
Modèle de Chimie-Transport, 59
Normalisation, 157
Notations des harmoniques sphériques, 83
Observations, 47
Observations assimilées, 36
Ondes de Rossby, 22
Outils numériques, 41
Oxydants, 12
Palm, 65
Perspectives, 143
Photochimie, 14
Préconditionnement, 86
Prise en compte des erreurs, 50
Problème inverse, 46
Publication acceptée à MWR, 99
Résolution de la diffusion en spectral, 159
Schéma Cariolle, 62
Structure verticale de l'atmosphère, 12
Temps de vie, 16
Théorie de la boucle externe, 90
Trou de la couche d'ozone, 29
Variable de contrôle, 47
Variables d'erreur, 51
Vecteur d'état, 47

Bibliographie

La bibliographie se fait après et non avant d'aborder un sujet de recherche.

Jean Perrin, physicien et écrivain français.

- [1] J. C. Adams and P. N. Swartztrauber. SPHEREPACK 2.0 : A Model Development Facility. Guidebook, NCAR, September 1997.
- [2] D. Allen, K. Pickering, B. Duncan, and M. Damon. Impact of lightning NO admissions on North American photochemistry as determined using the Global Modeling Initiative (gmi) model. *J. Geophys. Res.*, 115 : doi :1029/2010JD014062, 2010.
- [3] L. El Amraoui, J.-L. Attié, N. Semane, M. Claeysman, V.-H. Peuch, J. Warner, P. Ricaud, J.-P. Cammas, A. Piacentini, D. Cariolle, S. Massart, and H. Bencherif. Midlatitude Stratosphere - Troposphere Exchange as diagnosed by MLS O3 and MOPITT CO assimilated fields. *Atmos. Chem. Phys.*, 10 : 2 175–2 194, 2010.
- [4] P. Bechtold, E. Bazile, F. Guichard, P. Mascart, and E. Richard. A mass flux convection scheme for regional and global models. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 127 : 869–886, 2001.
- [5] F. Bouttier and P. Courtier. Data assimilation concepts and methods. Lecture Note from ECMWF Research Department, ECMWF, Reading, U-K, 1999.
- [6] G. P. Brasseur, J. J. Orlando, and G. S. Tyndall. *Atmospheric Chemistry and Global Change*. Oxford University Press, 1999.
- [7] G. P. Brasseur and S. Solomon. *Aeronomy of the middle atmosphere*. Third edition AOSL, Springer, 2005.
- [8] S. Buis, A. Piacentini, and D. Déclat. PALM : a computational framework for assembling high-performance computing applications. *Concur. and Comput. : Pract. and Exp.*, 18, Issue 2 : 231–245, 2006.
- [9] D. Cariolle. Présentation d'un modèle bidimensionnel photo-chimique de l'ozone stratosphérique. Note de travail, Établissement d'Études et de Recherches Météorologiques, Toulouse, France, 1982.
- [10] D. Cariolle and M. Déqué. Southern hemisphere medium-scale waves and total ozone disturbances in a spectral general circulation model. *J. Geophys. Res.*, 91 : 10 825–10 846, 1986.
- [11] D. Cariolle and H. Teyssède. A revised linear ozone photochemistry parameterization for use in transport and general circulation models : multi-annual simulations. *Atmos. Chem. Phys.*, 7 : 2 183–2 196, 2004.
- [12] M. L. Cathala. *Assimilation de mesures chimiques d'ozone au niveau de la tropopause dans un Modèle de Chimie-Transport Global*. PhD thesis, Sciences de l'Univers, de l'Environnement et de l'Espace - Toulouse III - France, 2004.

-
- [13] S. Chapman. On ozone and atomic oxygen in the upper atmosphere. 10 : 369–383, 1930.
- [14] M. Claeysman, J.-L. Attié, L. El Amraoui, D. Cariolle, V.-H. Peuch, H. Teyssède, B. Josse, P. Ricaud, S. Massart, A. Piacentini, J.-P. Cammas, N. J. Livesey, H. C. Pumphrey, and D. P. Edwards. A linear CO chemistry parameterization in a chemistry-transport model : evaluation and application to data assimilation. *Atmos. Chem. Phys.*, 10 : 6 097–6 115, 2010.
- [15] S. Cohn. An introduction to estimation theory. Office Note Series, Data Assimilation Office, Goddard Laboratory for Atmospheres, Greenbelt, Maryland 20 771, 1997.
- [16] P. Courtier, E. Andersson, W. Heckley, J. Pailleux, D. Vasiljelic, M. Hamrud, A. Hollingsworth, F. Rabier, and M. Fisher. The ECMWF implementation of threedimensional variational assimilation (3D-Var). I : Formulation. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 124 : 1 783–1 807, 1998.
- [17] P. Courtier and O. Talagrand. Variational Assimilation of Meteorological Observations With the Adjoint Vpvticity Equation. Part II : Numerical Results. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 113 : 1 329–1 347, 1987.
- [18] P. Courtier, J.-N. Thépaut, and A. Hollingsworth. A strategy for operational implementation of 4D-var, using an incremental approach. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 120 : 1 367–1 387, 1994.
- [19] P. J. Crutzen. The influence of nitrogen oxide on the atmospheric ozone content. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 96 : 320–325, 1970.
- [20] N. Daget. *Estimation d'ensemble des paramètres des covariances d'erreur d'ébauche dans un système d'assimilation variationnelle de données océaniques*. PhD thesis, Sciences de l'Univers, de l'Environnement et de l'Espace - Toulouse III - France, 2008.
- [21] R. Daley. *Atmospheric Data Analysis*. Cambridge Atmospheric and Space Science Series, Vol. 2, Cambridge University press, 1991.
- [22] R. Delams, G. Mégie, and V.-H. Peuch. *Physique et chimie de l'atmosphère*. Belin, Echelles, 2005.
- [23] G. Desroziers, L. Berre, B. Chapnik, and P. Poli. Diagnosis of observation, background and analysis-error statistics in observation space. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 131 : 3 385–3 396, 2005.
- [24] F.-X. Le Dimet and O. Talagrand. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations : Theoretical aspects. *Tellus*, 38 A : 97–110, 1986.
- [25] H. Elbern, H. Schmidt, and A. Ebel. Variational data assimilation for tropospheric chemistry modeling. *J. Geophys. Res.*, 102 : 15 967–15 985, 1997.
- [26] H. Elbern, J. Schwinger, and R. Botchorishvili. Chemical state estimation for the middle atmosphere by four-dimensional variational data assimilation : System configuration. *J. Geophys. Res.*, 115 : doi :10.1029/2009JD011953, 2010.
- [27] Q. Errera, F. Daerden, S. Chabrillat, J. C. Lambert, W. A. Lahoz, S. Viscardy, S. Bonjean, and D. Fonteyn. 4d-Var Assimilation of MIPAS chemical observations : ozone and nitrogen dioxide analyses. *Atmos. Chem. Phys.*, 8 : 6 169–6 187, 2008.
- [28] G. Evensen. Sequential data assimilation with a nonlinear quasigeostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. *J. Geophys. Res.*, 99 : 10 143–10 162, 1994.

-
- [29] J. C. Farman, B. G. Gardiner, and J. D. Shanklin. Large losses of total ozone in Antarctica reveal seasonal ClO_x/NO_x interaction. *Nature*, 315 : 207–210, 1985.
- [30] M. Fisher and D. J. Lary. Lagrangian four-dimensional variational data assimilation of chemical species. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 121 : 1 681–1 704, 1995.
- [31] E. L. Flemming. Modelling and Assimilation of Atmospheric Chemistry. Presentation, ECMWF, Reading, 2010.
- [32] E. L. Flemming, S. Chandra, J. J. Barnett, and M. Corney. Zonal mean temperature, pressure, zonal wind and geopotential height as functions of latitude. *Adv. Space Res.*, 10, Issue 12 : 11–59, 1990.
- [33] G. A. Folberth, D. A. Hauglustaine, J. Lathière, and F. Brocheton. Interactive chemistry in the Laboratoire de Météorologie Dynamique general circulation model : model description and impact analysis of biogenic hydrocarbons on tropospheric chemistry. *Atmos. Chem. Phys.*, 6, Issue 8 : 2 273–2 319, 2006.
- [34] J. P. F. Fortuin and H. Kelder. An ozone climatology base on ozonesonde and satellite measurements. *J. Geophys. Res.*, 103 : 31 709–31 734, 1998.
- [35] L. Froidevaux, Y. B. Jiang, A. Lambert, N. J. Livesey, W. G. Read, J. W. Waters, E. V. Browell, J. W. Hair, M. A. Avery, T. J. McGee, L. W. Twigg, G. K. Sumnicht, K. W. Jucks, J. J. Margitan, B. Sen, R. A. Stachnik, G. C. Toon, P. F. Bernath and C. D. Boone, K. A. Walker, M. J. Filipiak, R. S. Harwood and R. A. Fuller, G. L. Manney, M. J. Schwartz, W. H. Daffer, B. J. Drouin, R. E. Cofield, D. T. Cuddy, R. F. Jarnot, B. W. Knosp, V. S. Perun, W. V. Snyder, P. C. Stek, R. P. Thurstans, and P. A. Wagner. Validation of Aura Microwave Limb Sounder stratospheric ozone measurements. *J. Geophys. Res.*, 113 : D15S20, doi :10.1029/2007JD008771, 2008.
- [36] L. S. Gandin. *Objective Analysis of Meteorological Fields*. Israel Program for Scientific Translations ; [available from U.S. Dept. of Commerce, Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information, Springfield, Va], 1965.
- [37] G. Gaspari and S. Cohn. Construction of correlation functions in two and three dimension. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 125 : 723–757, 1999.
- [38] P. Gauthier, M. Tanguay, S. Laroche, S. Pellerin, and J. Morneau. Extension of 3DVAR to 4DVAR : Implementation of 4DVAR at the Meteorological Service of Canada. *Mon. Wea. Rev.*, 135 : 2 339–2 354, 2007.
- [39] A. J. Geer, W. A. Lahoz, S. Bekki, N. Bormann, Q. Errera, H. J. Eskes, D. Fonteyn, D. R. Jackson, M. N. Juckes, S. Massart, V.-H. Peuch, S. Rharmili, A., and Segers. The ASSET intercomparison of ozone analyses : method and first results. *Atmos. Chem. Phys.*, 6 : 5 445–5 474, 2006.
- [40] A. J. Geer, W. A. Lahoz, D. R. Jackson, D. Cariolle, and J. P. McCormack. Evaluation of linear ozone photochemistry parameterizations in a stratosphere-troposphere data assimilation system. *Atmos. Chem. Phys.*, 7 : 939–959, 2006.
- [41] A. Hollingsworth, R. J. Engelen, C. Textor, A. Benedetti, O. Boucher, F. Chevallier, A. Dethof, H. Elbern, H. Eskes, J. Flemming, C. Granier, J. W. Kaiser, J.-J. Morcrette, P. Rayner, V.-H. Peuch, L. Rouil, M. G. Schultz, A. J. Simmons, and The GEMS Consortium. Toward a Monitoring and Forecasting System For Atmospheric Composition : The GEMS Project. *Bull. Am. Met. Soc.*, 89,8 : 1 147–1 164, 2008.
- [42] J. R. Holton. *An Introduction to Dynamic Meteorology*. Elsevier Academic Press, 2004.

- [43] C. Honoré, L. Rouil, R. Vautard, N. Beekmann, B. Bessagnet, A. Dufour, C. Elichegaray, J. Flaud, L. Malherbe nad F. Meleux, L. Menut, D. Martin, A. Peuch, V.-H. Peuch, and N. Poisson. Predictability of European air quality : Assessment of 3 years of operational forecasts and analyses by the PREV’AIR system. *J. Geophys. Res.*, 113 : D04301, doi :10.1029/2007JD008761, 2008.
- [44] P. L. Houtekamer, L. Lefaiivre, J. Derome, H. Ritchie, and H. L. Mitchell. A system simulation approach to ensemble prediction. *Mon. Wea. Rev.*, 124 : 1 225–1 242, 1996.
- [45] V. Huijnen, J. Williams, M. Weele, T. van Noise, M. Krol, F. Dentener, A. Segers, S. Houwelling, W. Peters, J. de Laat, F. Boersma, P. Bergamaschi, P. van Velthoven, P. Le Sager, H. Eskes, F. Alkemade, R. Scheele, P. Nédélec, and H.-W. Pätz. The global chemistry transport model TM5 : description and evaluation of the tropospheric chemistry version 3.0. *Geosci. Model Dev.*, 3 : 445–473, 2010.
- [46] D. J. Jacob. *Introduction to atmospheric chemistry*. Princetown University Press, 1999.
- [47] I. N. James. *Introduction to circulating atmospheres*. Cambridge Atmospheric and Space Science Series, University of Reading, 1994.
- [48] B. Josse. *Représentation des processus de transport et de lessivage pour la modélisation de la composition chimique de l’atmosphère à l’échelle planétaire*. PhD thesis, Sciences de l’Univers, de l’Environnement et de l’Espace - Toulouse III - France, 2004.
- [49] B. Josse, P. Simon, and V.-H. Peuch. Radon global simulations with the multiscale chemistry and transport model MOCAGE. *Tellus*, 56 : 339–356, 2004.
- [50] R. E. Kalman. A new approach to linear filtering and prediction problems. *J. Basic. Eng.*, 82 : 35–45, 1960.
- [51] E. Kalnay. *Atmospheric modeling, data assimilation and predictability*. Cambridge University Press, 2003.
- [52] T. Lagarde. *Nouvelle approche des méthodes d’assimilation de données : les algorithmes de point selle*. PhD thesis, Toulouse III - France, 2000.
- [53] T. Lagarde, A. Piacentini, and O. Thual. A new representation of data assimilation methods : the PALM flow charting approach. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 127 : 189–207, 2001.
- [54] W. A. Lahoz, Q. Errera, R. Swinbank, and D. Fonteyn. Data assimilation of stratospheric constituents : a review. *Atmos. Chem. Phys.*, 7 : 5 745–5 773, 2007.
- [55] W. A. Lahoz, Q. Errera, S. Viscardy, and G. L. Manney. The 2009 stratospheric major warming described from synergistic use of BASCOE water vapour analyses and MLS observations. *Atmos. Chem. Phys.*, 11 : 4 689–4 703, 2011.
- [56] W. A. Lahoz, A. J. Geer, S. Bekki, N. Bormann, S. Ceccherini, H. Elbern, Q. Errera, H. J. Eskes, D. Fonteyn, D. R. Jackson, B. Khatatov, M. Marchand, S. Massart, V.-H. Peuch, S. Rharmili, M. Ridolfi, A. Segers, O. Talagrand, H. E. Thornton, A. F. Vik, and T. Von Clarmann. The assimilation of Envisat data (ASSET) project. *Atmos. Chem. Phys.*, 7 : 1 773–1 796, 2007.
- [57] S. Laroche, P. Gauthier, M. Tanguay, and S. Pellerin. Impact of the Different Components of 4DVAR on the Global Forecast System of the Meteorological Service of Canada. *Mon. Wea. Rev.*, 135 : 2 355–2 364, 2006.
- [58] F. Lefèvre, G. P. Brasseur, I. Folkins, A. K. Smith, and P. Simon. Chemistry of the 1991–1992 stratospheric winter : three-dimensional model simulations. *J. Geophys. Res.*, 99 : 8 183–8 195, 1994.

-
- [59] J. M. Lewis and J. C. Derber. The use of adjoint equations to solve a variational adjustment problem with advective constraints. *Tellus*, 37 A : 309–322, 1985.
- [60] J. L. Lions. *Optimal control of systemes governed by partial differential equations*. Springer-Verlag, New-York, 1971.
- [61] N. J. Livesey, M. J. Filipiak, L. Froidevaux, W. G. Read, A. Lambert, M. L. Santee, J. H. Jiang, H. C. Pumphrey, J. W. Waters, R. E. Cofield, D. T. Cuddy, W. H. Daffer, B. J. Drouin, R. A. Fuller, R. F. Jarnot, Y. B. Jiang, B. W. Knosp, Q. B. Li, V. S. Perun, M. J. Schwartz, W. V. Snyder, P. C. Stek, R. P. Thurstans, P. A. Wagner, M. Avery, E. V. Browell, J.-P. Cammas, L. E. Christensen, G. S. Diskin, R.-S. Gao, H.-J. Jost, M. Loewenstein, J. D. Lopez, P. Nedelec, G. B. Osterman, G. W. Sachse, and C. R. Webster. Validation of Aura Microwave Limb Sounder O₃ and CO observations in the upper troposphere and lower stratosphere. *J. Geophys. Res.*, 113 : D15S02, doi :10.1029/2007JD008805, 2008.
- [62] N. J. Livesey, W. G. Read, A. Lambert, R. E. Cofield, D. T. Cuddy, L. Froidevaux, R. A. Fuller, R. F. Jarnot, J. H. Jiang, Y. B. Jiang, B. W. Knosp, L. J. Kovalenko, H. M. Pickett, H. C. Pumphrey, M. L. Santee, M. J. Schwartz, P. C. Stek, P. A. Wagner, J. W. Waters, and D. L. Wu. Eos mls Version 2.2 Level 2 data quality and description document. Technical report, JPL, Pasadena, California, 2007.
- [63] A. C. Lorenc. A global three-dimensional multivariate statistical interpolation scheme. *Mon. Wea. Rev.*, 109 : 701–721, 1981.
- [64] A. C. Lorenc. Optimal nonlinear objective analysis. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 114 : 205–240, 1988.
- [65] J.-F. Louis. A parametric model of vertical eddy-fluxes in the atmosphere. *Bound.-Lay. Meteor.*, 17 : 187–202, 1979.
- [66] G. L. Manney, L. Froidevaux, J. W. Waters, M. L. Santee, W. G. Read, D. A. Flower, R. F. Jarnot, and R. W. Zurek. Arctic ozone depletion observed by UARS MLS during the 1994-95 winter. *Geophys. Res. Lett.*, 23 : 85–88, 1996.
- [67] S. Massart. *Méthodologies de l'assimilation de données. Application à la chimie atmosphérique et à la mécanique des structures*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse - Toulouse III - France, 2003.
- [68] S. Massart. Estimation de coefficients correctifs multiplicatifs pour les matrices de covariance d'erreur d'ébauche et d'observation du système d'assimilation valentina. Technical Report WN-AE-09-25, CERFACS, Toulouse, France, 2009.
- [69] S. Massart, D. Cariolle, and V.-H. Peuch. Vers une meilleure représentation de la distribution et de la variabilité de l'ozone atmosphérique par l'assimilation des données satellitaires. *C. R. Geosci.*, 337 : 1 305–1 310, 2005.
- [70] S. Massart, B. Pajot, A. Piacentini, and O. Pannekoucke. On the Merits of Using a 3D-FGAT Assimilation Scheme with an Outer Loop for Atmospheric Situation Governed Transport. *Mon. Wea. Rev.*, 138 : 4 509–4 522, 2010.
- [71] S. Massart, A. Piacentini, and O. Pannekoucke. Importance of using an ensemble estimated background error covariances for the quality of atmospheric ozone analyses. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, soumis, 2011.
- [72] M. Michou. *Modélisation du dépôt sec et des émissions d'espèces chimiques d'intérêt pour la qualité de l'air et pour la composition de la troposphère*. PhD thesis, Sciences de l'Univers, de l'Environnement et de l'Espace - Toulouse III - France, 2005.

- [73] I. Mirouze and A. T. Weaver. Representation of correlation functions in variational assimilation using an implicit diffusion operator. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 136 : 1 421–1 443, 2010.
- [74] L. T. Molina and M. J. Molina. Production of Cl_2O_2 by the self reaction of the ClO radical. *J. Phys. Chem.*, 91 : 433–436, 1987.
- [75] M. J. Molina and F. S. Rowland. Stratospheric sink for chlorofluoromethanes : chlorine atom catalysed destruction of ozone. *Nature*, 249 : 810–812, 1974.
- [76] G. Mégie. *Stratosphère et couche d’ozone*. Dunod, Cahier des Sciences de l’Univers 2, 1982.
- [77] O. Pannekoucke and S. Massart. Estimation of the local diffusion tensor and normalization for heterogeneous correlation modelling using a diffusion equation. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 134 : 1 425–1 438, 2008.
- [78] F. Rabier, H. Järvinen, E. Kilnder, J.-F. Mahfouf, and A. Simmons. The ECMWF operational implementation of four-dimensional variational assimilation. Part I : Experimental results with simplified physics. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 126 : 1 143–1 170, 2000.
- [79] P. J. Rasch and D. L. Williamson. On shape-preserving interpolation and semi-Lagrangian transport. *SIAM J. Sci. stat. comput.*, 11 : 656–686, 1990.
- [80] M. Rex, R. J. Salawitch, P. von der Gathen, N. R. P. Harris, M. P. Chipperfield, and B. Naujokat. Arctic ozone loss and climate change. *Geophys. Res. Lett.*, 31 : doi :10.1029/2003GL018844, 2004.
- [81] S. Ricci. *Assimilation variationnelle océanique : modélisation multivariée de la matrice de covariance d’erreur d’ébauche*. PhD thesis, Sciences de l’Univers, de l’Environnement et de l’Espace - Toulouse III - France, 2004.
- [82] D. A. Rotman, J. R. Tannahill, D. E. Kinnison, P. S. Connell, D. Bergmann, D. Proctor, J. M. Rodriguez, S. J. Lin, R. B. Rood, M. J. Prather, P. J. Rasch, D. B. Considine, R. Ramarosan, and S. R. Kawa. Global Modelling Initiative assessment model : Model description, integration, and testing of the transport shell. *J. Geophys. Res.*, 106 : 1 669–1 691, 2010.
- [83] Y. K. Sasaki. An objective analysis based on the variational method. *J. Meteorol. Soc. Japan*, II (36) : 77–88, 1958.
- [84] Y. K. Sasaki. Some basic formalisms in numerical variational analysis. *Mon. Wea. Rev.*, 98 : 875–883, 1970.
- [85] C. Scannel, D. Hurtmans, A. Boynard, J. Hadji-Lazaro, M. George, A. Delcloo, O. Tuinder, P.-F. Coheur, and C. Clerbaux. Antarctic ozone hole as observed by IASI/MetOp for 2008–2010. *Atmos. Meas. Tech.*, 5 : 123–139, 2012.
- [86] W. R. Stockwell, F. Kirchner, M. Kuhn, and S. Seefeld. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modelling. *J. Geophys. Res.*, 102 : 25 847–25 879, 1997.
- [87] P. N. Swartztrauber. Computing on the sphere. Part I : Scalar harmonic analysis. Working note, NCAR, Juin 2004.
- [88] O. Talagrand. Assimilation of observations, an introduction. *J. Meteorol. Soc. Japan*, 75 : 191–209, 1997.
- [89] O. Talagrand. *A posteriori* verification of analysis and assimilation algorithms. Proceedings of the ECMWF Workshop on Diagnosis of Data Assimilation System, ECMWF, Reading, U-K, 1999.

-
- [90] O. Talagrand. *Bayesian estimation. Optimal interpolation. Statistical linear estimation.* Data Assimilation for the Earth System, NATO Advanced Study Institute (ASI) Series, R. Swinbank and V. Shutyaev and W. A. Lahoz, Kluwer, 2003.
- [91] O. Talagrand. Objective Validation and Evaluation of Data Assimilation. Proceedings of Seminar on Recent developments in data assimilation for atmosphere and ocean, ECMWF, Reading, Shinfield Park, 2003.
- [92] O. Talagrand and P. Courtier. Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. Part I : Theory. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 113 : 1311–1328, 1987.
- [93] H. Teyssedre, M. Michou, and H. Clark et al. A new tropospheric and stratospheric Chemistry and Transport Model MOCAGE-Climat for multi-year studies : evaluation of the present-day climatology and sensitivity to surface processes. *Atmos. Chem. Phys.*, 7 : 5815–5860, 2007.
- [94] W. C. Thacker and R. B. Long. Fitting dynamics to data. *J. Geophys. Res.*, 93 : 1227–1240, 1988.
- [95] J.-N. Thépaut and P. Courtier. Four dimensional variational data-assimilation using the adjoint of a multi-level primitive-equation model. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 117 : 1225–1254, 1991.
- [96] M. Tiedtke. A comprehensive mass flux scheme for cumulus parametrization in large scale models. *Mon. Wea. Rev.*, 117 : 1779–1800, 1989.
- [97] Y. Trémolet. Model-error estimation in 4D-Var. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 133 : 1267–1280, doi :10.1002/qj.94, 2007.
- [98] R. J. van der A, M. A. F. Allaart, and H. J. Eskes. Multi sensor reanalysis of total ozone. *Atmos. Chem. Phys.*, 10 : 11277–11294, 2010.
- [99] F. Veersé and J.-N. Thépaut. Multiple-truncation incremental approach for four-dimensional variational data assimilation. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 124 : 1889–1908, 1997.
- [100] A. Vidard. *Vers une prise en compte de l'erreur modèle en assimilation 4D Variationnelle. Application à un modèle réaliste d'océan.* PhD thesis, Université Joseph Fourier - Grenoble - France, 2001.
- [101] P. A. Vidard, E. Blayo, F. X. Le Dimet, and A. Piacentini. 4D Variational Data Analysis with Imperfect Model. *J. of Flow, Turb. and Comb.*, 65 : 489–504, doi :10.1023/A :1011452303647, 2001.
- [102] C. E. Wayne and R. P. Wayne. *Photochemistry.* Oxford Univ. Press., Vol.39, 1996.
- [103] A. T. Weaver and P. Courtier. Correlation modelling on the sphere using a generalized diffusion equation. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 127 : 1815–1846, 2001.
- [104] WMO. Scientific Assessment of Ozone Depletion : 2002. Global Ozone Research and Monitoring Project-Report 47, World Meteorological Organization, Geneva, Switzerland, 2003.
- [105] WMO. Scientific Assessment of Ozone Depletion : 2006. Global Ozone Research and Monitoring Project-Report 50, World Meteorological Organization, Geneva, Switzerland, 2007.
- [106] C. Wunsch. *The ocean circulation as an inverse problem.* Cambridge University press, 1996.

PH.D. DISSERTATION

AUTHOR : Benjamin Pajot
TITLE : Ozone analysis and forecast from a high resolution satellite data
assimilation
ADVISORS : Daniel Cariolle and Sébastien Massart
PLACE and DATE of THESIS DEFENCE : CERFACS, December 12th, 2011

ABSTRACT :

To improve the representation of the atmospheric ozone field given by some observations or a numerical model, one can combine these two sources of information by data assimilation techniques. The pixel size of the data coming from the instruments on board the latest generation of satellites is however much lower than the horizontal resolution usually used within global Chemical-Transport Models (CTMs). These data bring information on small-scale structures of the ozone field that can only be represented in the model by increasing its resolution.

In order to assimilate small-scale information within the Météo-France Mocage CTM with a high resolution horizontal grid while keeping reasonable execution cost, we have developed a spectral version of the Cerfacs Valentina data assimilation system. We use the external loop algorithm in conjunction with the 3D-Var with FGAT variational method. We show that this combination deteriorates the analyses for atmospheric situations governed by rapid transport. As a consequence we choose to use the variational 4D-Var method in terms of increment to perform high resolution ozone simulations.

We use the Valentina system with the Mocage CTM both at low and high horizontal resolutions for the month of September 2008 during which small-scale structures are present in the ozone field at the vicinity of the Antarctic polar vortex. The total ozone columns from the IASI instrument have been assimilated because of their high spatial repartition. They have been averaged on the low and the high model grids giving two super-observation sets. We combine them with the profiles from the MLS instrument in order to constrain the vertical repartition of the information in the stratosphere and the upper troposphere during the data assimilation process.

The model resolution increase improves the CTMs direct simulations and, to a lesser extent, the analyses obtained from the assimilation of the low resolution data set. However, the increase of the super-observation resolution deteriorates the analyses at some vertical levels because the MLS data that constrain the vertical shape of the ozone profile are sparse compared to IASI data. We point out the need to have a source of information on the ozone vertical distribution as dense as the assimilated total columns, such as the information brought by the Averaging Kernels.

KEY WORDS : atmospheric chemistry, ozone, variational data assimilation,
Metop-A/IASI.
SUBJECT : Atmospheric Chemistry and Physics
LABORATORY ADDRESS : CERFACS/CNRS URA 1875
42 Avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex

THÈSE DE DOCTORAT

AUTEUR : Benjamin Pajot
TITRE : Analyse et prévision de l’ozone issues d’une assimilation de données satellitaires à haute résolution
DIRECTEURS DE THÈSE : Daniel Cariolle et Sébastien Massart
LIEU ET DATE DE SOUTENANCE : CERFACS, 12 décembre 2011

RÉSUMÉ :

Pour améliorer la représentation du champ d’ozone atmosphérique fournie par des observations ou bien par un modèle numérique, on peut combiner ces deux sources d’information par des techniques d’assimilation de données. La taille des pixels des données issues des instruments embarqués à bord des satellites de dernière génération est cependant bien inférieure à la résolution horizontale couramment utilisée dans les Modèles de Chimie-Transport (MCT) en version globale. Ainsi ces observations apportent de l’information sur des structures de petite échelle du champ d’ozone ne pouvant être représentées par le modèle qu’avec l’augmentation de sa résolution.

Dans le but d’assimiler l’information de petite échelle au sein du MCT Mocage de Météo-France avec une grille horizontale haute résolution tout en conservant un coût d’exécution raisonnable, nous avons développé une version spectrale du système d’assimilation de données Valentina du Cerfacs. Puis nous utilisons l’algorithme de la boucle externe conjointement avec la méthode variationnelle 3D-Var avec FGAT. Nous montrons que cette combinaison dégrade les analyses dans le cas de situations atmosphériques dominées par le transport. En conséquence, nous optons dans la suite pour la méthode variationnelle 4D-Var en terme d’incrément pour procéder aux simulations d’ozone haute résolution.

Nous utilisons le système Valentina avec le MCT Mocage à basse et haute résolutions horizontales sur le mois de septembre 2008 durant lequel des structures de petite échelle sont présentes dans le champ d’ozone au voisinage du vortex polaire antarctique. Les colonnes totales d’ozone de l’instrument IASI, choisies pour leur haute répartition spatiale, ont été moyennées sur grilles modèle basse et haute résolution en deux jeux de super-observations. Nous les combinons aux profils d’ozone de l’instrument MLS pour contraindre la répartition verticale de l’information dans la stratosphère et la haute troposphère lors du processus d’assimilation de données.

L’augmentation de résolution du modèle améliore les simulations directes du MCT et, dans une moindre mesure, les analyses issues de l’assimilation du jeu de données combinées basse résolution. En revanche, l’augmentation de résolution dans les super-observations conduit à une dégradation des analyses à certains niveaux verticaux car les données de MLS qui contraignent la structure verticale du profil d’ozone sont éparées par rapport aux données de IASI. Nous mettons ce résultat en lien avec le besoin d’avoir une source d’information sur la distribution verticale de l’ozone aussi dense que le jeu de données de colonnes totales assimilées telle l’information fournie par les *Averaging Kernels*.

MOTS-CLÉS : chimie atmosphérique, ozone, assimilation de données variationnelle, *Metop-A*/IASI.
DISCIPLINE : Physique et Chimie de l’Atmosphère
ADRESSE DU LABORATOIRE : CERFACS/CNRS URA 1875
42 Avenue G. Coriolis 31057 Toulouse Cedex
