



HAL
open science

**Observation satellitaire de la pollution à l'ozone par
synergie multispectrale à trois bandes
Ultraviolet+Visible+Infrarouge**

Yohann Chailleux

► **To cite this version:**

Yohann Chailleux. Observation satellitaire de la pollution à l'ozone par synergie multispectrale à trois bandes Ultraviolet+Visible+Infrarouge. Océan, Atmosphère. Université Paris-Est, 2018. Français. NNT : 2018PESC1033 . tel-02066124

HAL Id: tel-02066124

<https://theses.hal.science/tel-02066124v1>

Submitted on 13 Mar 2019

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.

ÉCOLE DOCTORALE : Sciences Ingénierie et Environnement

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue le 17 Juillet 2018, à Créteil, pour l'obtention du titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS-EST

**Observation satellitaire de la pollution à l'ozone
par synergie multispectrale à trois bandes
Ultraviolet+Visible+Infrarouge**

Par Yohann Chailleux

**LISA Laboratoire Inter-universitaire des Systèmes Atmosphériques,
UMR 7583**

Thèse dirigée par Juan Cuesta

Membres du jury :

Jean-Luc Attié	Professeur d'université	Rapporteur
Hélène Brogniez	Maître de conférences	Rapportrice
Matthias Beekmann	Directeur de recherches	Examineur
Cyrille Flamant	Directeur de recherches	Examineur
Ha Tran	Chargée de recherches	Examinatrice
Juan Cuesta	Maître de conférences	Directeur de thèse
Laure Brooker	Ingénieure de recherche	Invitée

Remerciements

J'aimerais, à travers ses quelques lignes, remercier l'ensemble des personnes qui m'ont, de part leur aide, leurs conseils et leurs soutien, permis de mener à bien cette thèse.

Tout d'abord, j'aimerais remercier Hélène Brogniez et Jean-Luc Attié d'avoir accepté de relire cette thèse et d'en être les rapporteurs, ainsi que Ha Tran, Cyrille Flamant et Matthias Beekmann pour avoir accepté de faire parti de mon jury de thèse.

Ensuite, je tiens à remercier Carole Deniel du CNES et Laure Brooker et Roland Cantié d'Airbus Defense and Space pour avoir permis à cette thèse de se faire mais également à Gilles Bergametti et Agnès Perrin sans qui tout cela n'aurait pas été possible non plus.

Bien entendu, j'aimerais remercier sincèrement Juan Cuesta, pour m'avoir encadré pendant ses 3 ans et demi. Merci pour ta présence, ta patience et ta gentillesse, pour tes mots d'encouragement, pour tes remarques parfois critiques mais toujours sincère et surtout nécessaires dans les périodes où j'en ai eu vraiment besoin. Je tiens également à remercier l'ensemble du groupe Polsat Audrey Cheiney, Gaelle Dufour, Adriana Coman, Gilles Foret, Mathieu Lacharte, Lorenzo Costantino, Matthias Beekmann et Maxim Eremenko pour leurs accueil au sein du groupe et du laboratoire, pour leur gentillesse, leurs conseils et avis et leurs temps passés à répondre présent si nécessaire. J'ai d'ailleurs une pensée toute particulière pour Maxim qui a donné une grand partie de son temps à m'aider à me sortir d'un code dont je ne connaissais pas le langage 6 mois plus tôt. Merci également à Pascale Chelin qui a toujours eu une pensée ou un petit mot d'encouragement pour moi et grâce à qui j'ai pu réussir à associer le travail d'ATER et la fin d'une thèse. Merci également à l'ensemble des membres du LISA pour tous ces moments passés durant ces 3 ans et demi.

Enfin, j'aimerais bien entendu remercier mes proches, familles et amis, qui m'ont toujours soutenu et encouragé dans mes choix, épaulé et écouté quand j'en ai besoin, qui seront toujours là pour moi et sans qui je ne serai pas qui je suis aujourd'hui.

Du fond du cœur, merci à tous...

Sommaire

Résumé	9
Chapitre 1 : L’ozone troposphérique	11
1 Pollution atmosphérique.....	12
2 Impacts environnementaux de l’ozone.....	14
2.1 Impact sanitaire	14
2.2 Impacts sur les écosystèmes.....	15
3 Normes et seuils recommandés pour la pollution à l’ozone.....	15
4 Cycle de l’ozone troposphérique	17
4.1 Les régimes chimiques associés à la production/consommation de l’ozone.....	18
4.1.1 Régime chimique saturé en NO _x	19
4.1.2 Régime chimique limité en NO _x	20
4.2 Cycle de vie de l’ozone dans un panache urbain.....	22
4.3 Transports et dépôts au sol.....	22
5 Mesure de l’ozone troposphérique	23
5.1 Les mesures in situ	23
5.2 La télédétection de l’ozone atmosphérique	25
5.2.1 Mesures satellitaires dans l’UV	27
5.2.2 Mesures satellitaires dans l’IR.....	29
5.2.3 Synergie multispectrale actuelles des mesures satellitaires	30
5.2.4 Synergie multispectrales futures	32
6 Besoin de nouvelles observations de l’ozone et défis.....	34
7 Objectifs de ma thèse	35
Chapitre 2 : Méthodologie de restitution du profil vertical d’ozone	39
1 Méthode générale de restitution de la composition de l’atmosphère	40
1.1 Modèle direct.....	41
1.2 Modèle inverse.....	42
2 Méthode de restitution de l’ozone par couplage multispectral.....	43
2.1 Mesures satellitaires	45
2.1.1 Mesures de IASI dans l’infrarouge	45
2.1.2 Mesures de GOME-2 de l’UV au proche IR.....	46
2.2 Simulation directes des spectres dans l’UV, VIS et IR.....	48

2.2.1	Absorption du rayonnement par les espèces gazeuses.....	48
2.2.2	Conditions météorologiques.....	48
2.2.3	Albédo de surface	49
2.2.4	Impact radiatif des nuages et des aérosols	49
2.3	Inversion multispectrale du profil d'ozone.....	50
2.3.1	Vecteur de mesure y	50
2.3.2	Jacobiens K	50
2.3.3	Vecteur d'état x	52
2.3.4	Contraintes d'inversion	53
2.3.5	Estimation des erreurs.....	54
2.3.6	Performance de la restitution de l'ozone.....	54
2.3.7	Performances de la méthode multispectrale à 2 bandes	55
3	Conclusions	58

Chapitre 3 : Développement de la méthode de restitution de l'ozone dans la bande visible de Chappuis..... 61

1	Etapes du développement de la méthode VIS de restitution de l'ozone	62
2	Simulation du spectre de réflectance dans le VIS avec VLIDORT.....	62
2.1	Sections efficaces des gaz absorbant dans la bande VIS.....	63
2.2	Simulation de l'impact radiatif des aérosols.....	64
2.3	Albédo de surface à haute résolution spectrale	65
3	Choix des longueurs d'onde VIS pour restituer l'ozone.....	67
4	Sélection des variables d'ajustement associées à la bande VIS.....	73
5	Estimation des erreurs des restitutions de l'ozone UV, VIS et UV+VIS.....	75
6	Tests de sensibilité.....	78
6.1	Impact de l'albédo de surface sur la réflectance terrestre	78
6.2	Influence de la couverture nuageuse.....	80
6.3	Angles de visée du satellite	81
7	Conclusions	84

Chapitre 4 : Simulations des observations satellitaires de l'ozone par couplage multispectral avec la bande visible de Chappuis..... 87

1	Simulateur des observations multispectrales de l'ozone.....	88
2	La pseudo-réalité.....	89
2.1	Le modèle MOCAGE.....	89
2.2	Comparaison entre MOCAGE et des mesures réelles de IASI+GOME2	89

2.3	Modifications empiriques des sorties MOCAGE.....	90
2.3.1	Couverture nuageuse	91
2.3.2	Température de surface Ts.....	91
2.3.3	Profil vertical de température T(z)	93
3	Période d'analyse : un épisode estival de pollution à l'ozone en Europe.....	93
4	Simulation des performances des couplages des mesures IASI et GOME-2	94
4.1	Sensibilité à l'ozone sur la troposphère.....	94
4.2	Restitution de la répartition horizontale de l'ozone dans la très basse troposphère.....	99
4.3	Evolution temporelle des performances de la restitution multispectrale de l'ozone dans la très basse troposphère.....	100
4.4	Sensibilité à l'albédo de surface	106
5	Simulation des observations géostationnaires de l'ozone avec MAGEAQ.....	109
5.1	Caractéristiques instrumentales de MAGEAQ	110
5.2	Sensibilité à l'ozone sur la troposphère.....	110
5.3	Restitution de la répartition horizontale de l'ozone dans la très basse troposphère.....	113
5.4	Evolution de la sensibilité de MAGEAQ durant le cycle diurne	115
5.5	Comparaison avec d'autres simulations des performances de MAGEAQ	116
6	Conclusion	118
Chapitre 5 : Observations réelles de l'ozone troposphérique par le premier couplage multispectral à 3 bandes IASI+GOME3		121
1	Ajustement des spectres réels de réflectance dans le visible.....	122
2	Premières observations réelles de l'ozone troposphérique avec IASI+GOME3.....	125
2.1	Concentrations d'ozone observées par IASI+GOME3.....	126
2.2	Sensibilité de la version actuelle de l'approche IASI+GOME3	136
3	Conclusions	138
Conclusions de la thèse		141
Perspectives.....		147
Acronymes.....		149
Bibliographie		151

Résumé

« Observation satellitaire de la pollution à l’ozone par synergie multispectrale à trois bandes Ultraviolet+Visible+Infrarouge »

La qualité de l’air est un enjeu environnemental majeur de notre société. Cette thèse se focalise sur l’observation depuis l’espace du polluant gazeux majeur, l’ozone troposphérique. Les instruments satellitaires de nouvelle génération permettent de le mesurer journalièrement aux échelles régionales à globale. Cependant, les mesures d’un seul domaine spectral n’amènent pas d’information suffisante pour quantifier les concentrations de l’ozone dans la couche limite atmosphérique, où se situe l’air que nous respirons.

Le couplage des mesures de multiples domaines spectraux offre un fort potentiel pour mieux caractériser la pollution à l’ozone. La première approche multispectrale à 2 bandes combinant les mesures de l’infrarouge (IR) de IASI et l’ultraviolet (UV) de GOME-2 a été développée au laboratoire LISA, que j’ai intégré dans le cadre de ma thèse.

L’objectif de mon travail de thèse est de franchir un pas supplémentaire dans la quantification de la pollution à l’ozone en incluant la bande visible (VIS) de Chappuis, afin de développer un couplage multispectral inédit à trois bandes spectrales UV+VIS+IR. Premièrement, j’ai mis au point une approche pour extraire l’information sur l’ozone des spectres VIS de GOME-2, en sélectionnant les longueurs d’onde affectées majoritairement par l’absorption à l’ozone et rejetant celles avec des absorptions d’autres gaz, ainsi que déterminant les variables d’ajustement conjoint de l’approche (profil vertical d’ozone, albédo de surface, shifts spectraux, etc) et les bases de données nécessaires pour simuler les spectres VIS (albédo de surface, spectroscopie).

Ensuite, j’ai mis en œuvre la méthode multispectrale à trois bandes UV+VIS+IR, premièrement sur des observations simulées défilantes de IASI et GOME-2 et géostationnaires de MAGEAQ afin d’estimer l’amélioration en terme de sensibilité et précision, par rapport aux méthodes existantes.

Dernièrement, j’ai appliqué l’approche multispectrale à 3 bandes à des observations satellitaires réelles de IASI et GOME-2. Des comparaisons avec d’autres données montrent des meilleures performances des nouvelles observations UV+VIS+IR pour caractériser des événements de pollution à l’ozone, par rapport à l’approche à 2 bandes.

Mots clés : Ozone troposphérique, mesures satellitaires, couplage spectral

Chapitre 1 :

L'ozone troposphérique

Ce travail de thèse porte sur l'observation satellitaire du polluant gazeux majeur, l'ozone troposphérique. En effet, l'ozone, lorsqu'il est présent dans la troposphère, soit la couche atmosphérique où nous respirons, est un puissant oxydant irritant pour les voies respiratoires et les yeux, pouvant causer le développement de maladies pulmonaires potentiellement mortelles lors d'exposition à long-terme. Il est donc primordial de surveiller ces concentrations à l'échelle globale, avec la meilleure précision possible.

Dans ce chapitre, nous introduirons le contexte sociétal de la pollution atmosphérique, en identifiant les impacts sanitaires et environnementaux de l'ozone troposphérique, ainsi que les normes des concentrations maximales recommandées pour la pollution à l'ozone. Une description de son cycle de vie au sein de la troposphère est ensuite donnée. Puis, un aperçu de l'état de l'art des méthodes de mesure et des missions spatiales utilisées pour l'observation de l'ozone est présenté. Ce chapitre conclut avec une description des besoins actuels en observation de la pollution à l'ozone et une description des objectifs de cette thèse pour y répondre.

1 Pollution atmosphérique

L'atmosphère, du mot grec *atmos* (vapeur) et *spaira* (sphère), est l'enveloppe composée de gaz et de particules, soumise à la pesanteur de la Terre, qui recouvre intégralement la surface de cette dernière. Elle joue un rôle de bouclier naturel puisqu'elle absorbe une partie du rayonnement solaire incident d'une part et retient la chaleur réémise par la surface d'autre part (effet de serre), permettant ainsi d'obtenir des conditions adéquates au développement de la vie.

Si l'atmosphère a une épaisseur de plusieurs centaines de kilomètres, sa partie la plus dense, qui représente environ 80% de sa masse totale, se trouve dans la troposphère, soit la couche atmosphérique qui s'étend de la surface à 7-8 km aux pôles et jusqu'à 13-14 km au niveau de l'équateur. Dans cette couche, l'atmosphère est majoritairement composée de 78% de diazote et de 21% de dioxygène ainsi que de composés plus minoritaires tels que le dioxyde de carbone (CO_2), la vapeur d'eau (H_2O) ou encore les gaz rares. Mais au cours du dernier siècle, l'explosion démographique et le développement des activités agricoles et industrielles, amenant un rejet massif de polluants, ont affecté l'équilibre naturel de l'atmosphère en modifiant significativement sa composition. Or ces rejets massifs de polluants dans l'atmosphère sont responsables d'une dégradation de la qualité de l'air à l'échelle mondiale. En effet, beaucoup de ces polluants ont des effets nocifs sur l'homme puisqu'ils sont notamment responsables de maladies cardio-vasculaires, d'accidents vasculaires cérébraux ou encore d'infections respiratoires aiguës. Cette pollution de la troposphère constitue donc un problème majeur actuel pour l'homme qui risque d'augmenter dans les années à venir avec l'accroissement démographique.

Les rejets massifs de polluants dans l'atmosphère dégradent ainsi la qualité de l'air que nous respirons mais la modification de la composition de l'atmosphère implique également un risque de modification important du climat. En effet, des études menées par le groupe intergouvernemental sur l'évolution du climat de l'ONU ont mis en avant les bouleversements causés par l'homme sur le climat global de la Terre ainsi que les très probables lourdes conséquences à venir (rapports du GIEC, 1990, 1995, 2001, 2007 et 2014). Ainsi, la forte augmentation depuis l'ère préindustrielle des concentrations de gaz traces stables comme le CO_2 ou le méthane (CH_4) a induit un effet de serre additionnel qui se traduit par une hausse des températures dans la troposphère. Ce réchauffement global de quelques degrés, qui va s'accroître dans les années à venir, a des conséquences importantes sur l'environnement et le climat et donc sur notre société. Pour lutter contre ce réchauffement, la grande majorité des Etats du monde se mobilise depuis le début des années 90 en s'accordant sur des traités limitant les rejets de gaz à effet de serre, cela afin de freiner cette montée des températures. La dernière grande conférence mondiale, la COP21, s'est tenue à Paris en 2015 et a réuni 223 Etats. Mais ces mesures ne pourront pas stopper ce réchauffement, uniquement le ralentir.

Il est important de souligner également que la qualité de l'air étant très dépendante des conditions météorologiques, cette augmentation des températures, impliquant donc une modification du climat, va accentuer ce phénomène de dégradation de la qualité de l'air (Jacob et al, 2009).

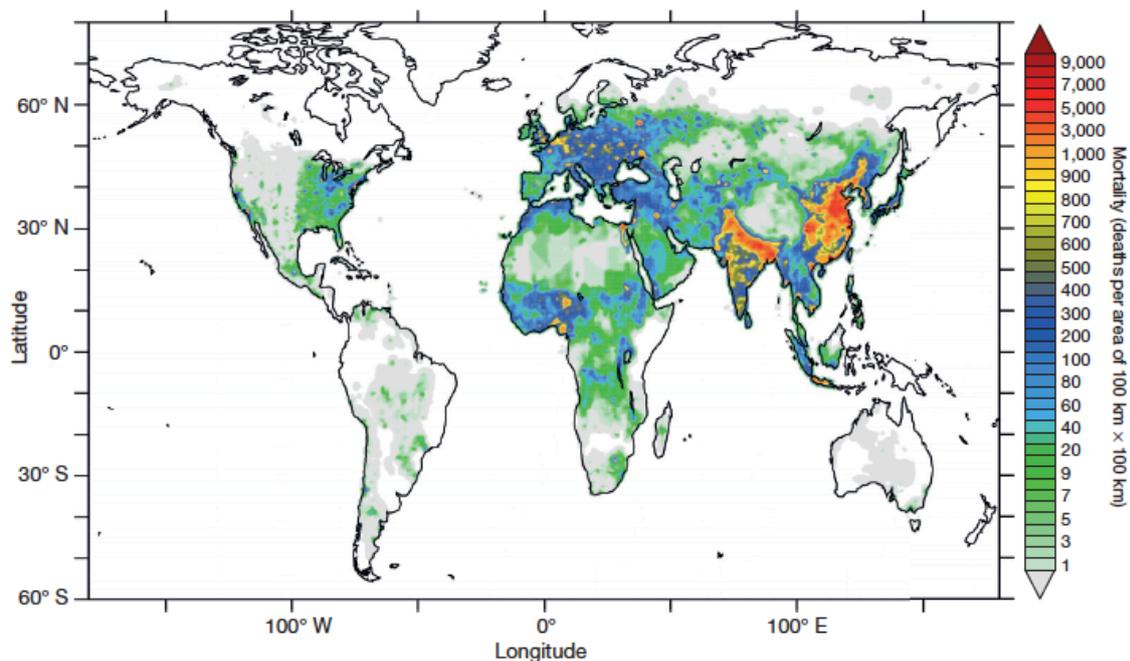


Figure 1 : Mortalité liée à la pollution de l'air extérieure en 2010 (Lelieveld et al., 2015)

La figure 1 montre la répartition sur le globe du taux de mortalité prématurée associé à la pollution de l'air extérieure (Lelieveld et al., 2015). Pour cela, les chercheurs ont utilisé un modèle qui associe les forts taux de polluants dans l'air au risque de développement de maladies graves et potentiellement mortelles. Les polluants choisis sont ici l'ozone (O_3), soit le polluant gazeux dont l'impact sanitaire est le plus important actuellement avec les aérosols dont le diamètre est inférieur à $2,5 \mu m$ appelées aussi particules fines ou $PM_{2.5}$ (Particulate Matter). Dans ce modèle, ils ont considéré que toutes les particules fines avaient le même niveau de toxicité pour l'homme quelque soit leurs sources et leurs compositions chimiques. Cette démarche est la même que celle utilisée dans le cadre des politiques nationales de réglementation de la qualité de l'air et au sein des lignes directrices sur la qualité de l'air de l'Organisation Mondiale de la Santé (OMS). Chaque pixel représente la mortalité associée à la pollution extérieure pour des zones de $100 km \times 100 km$, les zones en blanc étant des zones où les concentrations moyennes annuelles en $PM_{2.5}$ et en O_3 sont inférieures à un seuil fixé et donc où aucune surmortalité n'est attendue.

Avec cette étude, il a été estimé que pour l'année 2010, la pollution extérieure est responsable du décès prématuré de 3,3 millions de personnes dans le monde dont 142 000 associés à des maladies pulmonaires obstructives chroniques (MPOC) liées à une exposition chronique à de fortes concentrations d' O_3 .

S'il on ajoute à cela les 3,5 millions de décès prématurés associées à la pollution intérieure, et en considérant la population mondiale à 6,8 milliards d'êtres humains en 2010, on obtient une mortalité moyenne mondiale attribuable à la pollution atmosphérique de 5 sur 10 000 décès par an. Les zones du globe ayant la mortalité par habitant la plus élevée se situent majoritairement en Asie, ce qui peut s'expliquer par les concentrations importantes de polluants mesurées dans ces régions associées à une très forte densité de population. Ainsi, en Chine, la mortalité attribuable à la pollution

atmosphérique est d'un ordre de grandeur supérieure à celui attribuables aux accidents de la route et se classe même parmi les principales causes de décès dans ce pays, alors qu'elle est la principale cause de mortalité en Inde.

Selon une autre étude, 92% de la population mondiale vit dans des lieux de vie où les niveaux de qualité de l'air ne respectent pas les limites fixées par l'Organisation mondiale de la santé (OMS). En effet, si les périodes de fortes pollution sont particulièrement dangereuses pour les personnes sensibles comme les enfants, les personnes âgées ou encore les personnes ayant des troubles respiratoires, l'exposition chronique à des concentrations de polluants non négligeables est nocif pour tous. Ainsi, selon les calculs de l'OMS, environ 3 millions de personnes meurent tous les ans des effets de la pollution de l'air, ce qui en fait la 4^{ème} cause de décès prématurés derrière les risques métaboliques (diabète, cholestérol élevé, hypertension), l'alimentation et le tabagisme. En 2015, près de 19 milliards d'euros ont été consacrés à des soins de santé liés à la qualité de l'air et 1,2 milliard de journées de travail ont été perdues.

L'étude et la surveillance de la qualité de l'air font donc aujourd'hui parti des enjeux écologiques majeurs de notre société, et parmi les nombreux polluants atmosphériques observés, l'ozone, du fait de sa forte nocivité pour l'homme, est un polluant gazeux particulièrement surveillé.

2 Impacts environnementaux de l'ozone

2.1 Impact sanitaire

L'ozone, de formule chimique « O₃ », est une molécule composée de trois atomes d'oxygènes qui est présente naturellement à l'état gazeux dans l'atmosphère. S'il s'agit bien de la même molécule, on distingue généralement l'ozone stratosphérique de l'ozone troposphérique, leurs effets et impacts sur l'homme et l'environnement étant radicalement différents.

L'ozone est considéré comme un important polluant atmosphérique lorsqu'il se trouve dans la troposphère, couche atmosphérique proche de la surface où l'on vit et respire. En effet, étant un puissant oxydant, l'ozone est un poison protoplasmique qui peut altérer à court terme les fonctions cellulaires au niveau des muqueuses oculaires et pulmonaires et provoquer ainsi une irritation des yeux et des voix aériennes supérieures, causant toux et maux de tête. En cas d'exposition à plus long terme, l'ozone pourrait amener des complications plus importantes au niveau de la santé avec le développement de maladies pulmonaires obstructives chroniques (MPOC), potentiellement mortelles. Dans une étude publiée en 2009 (Jerrett et al., 2009), sur une cohorte de 448 850 participants suivis pendant 18 ans et vivant dans une zone métropolitaine où l'on enregistre régulièrement des concentrations significatives de polluants, 118 777 décès sont survenus, dont 58 775 par causes cardio-pulmonaires (48 884 par causes cardiovasculaires et 9 891 par causes respiratoires). A l'aide d'un modèle, les chercheurs ont pu étudier l'association entre les indicateurs d'exposition chronique aux différents polluants étudiés et la survenue d'un décès au cours de la période de suivie. Ainsi, ils ont obtenu que, lorsqu'ils ne prennent en compte dans le modèle uniquement l'O₃, l'exposition à l'O₃ est associée à une augmentation du risque de

décès de causes cardio-vasculaires et respiratoires. Et dans les modèles incluant les $PM_{2.5}$ en tant que co-polluant, l' O_3 n'est plus associée à la mortalité cardiovasculaire mais restait toujours significativement associée à la mortalité pour causes respiratoires. Cette étude est l'une des premières à montrer de manière convaincante un effet de l'exposition chronique à l' O_3 sur la mortalité à long-terme par maladie respiratoire. D'autres études (Lin et al., 2008 ; Rage et al., 2009 ; Parker et al., 2009) ont également mis en avant le lien entre une exposition chronique à l' O_3 et le développement d'asthme, ou de diverses allergies respiratoires notamment chez l'enfant.

Présent également au sein de la stratosphère qui contient 90% de sa concentration totale, l'ozone forme ce que l'on appelle la couche d'ozone, primordiale pour la vie sur Terre puisqu'elle absorbe les rayonnements solaires nocifs lorsqu'ils traversent la stratosphère. L'ozone stratosphérique est devenu mondialement connu depuis qu'un « trou » dans la couche d'ozone a été détecté. Des études ont démontré que cette destruction de l'ozone était due à une multitude de mécanismes induits par le rejet massif de CFC (Composés Chloro-Fluoro-Carbone) par l'homme dans l'atmosphère. Ainsi la lutte contre la destruction de la couche d'ozone a été un des grands enjeux écologiques de ses dernières années et a amené les Nations Unies à adopter le Protocole de Montréal en 1987, protocole imposant des obligations d'élimination progressive pour toutes les principales substances appauvrissant la couche d'ozone.

2.2 Impacts sur les écosystèmes

Si l'ozone est nocif pour l'homme, le pouvoir oxydant de ce gaz a également un impact important sur la faune et la flore. En effet, il va, pour la faune, avoir un effet similaire à celui sur l'homme avec une incidence sur les fonctions respiratoires. Pour les plantes, l'ozone va altérer les différents processus physiologiques et donc impacter leur développement. Une étude (Morgan et al., 2003), effectuée sur des pousses de soja (plante très cultivée dans le monde et représentative d'un grand nombre d'autres espèces) exposées à des concentrations chroniques d' O_3 , a montré une baisse moyenne de la taille de la plante de près d'un tiers et une diminution du rendement des semences d'un quart par rapport à des pousses non exposées. De plus, en cas de doses aiguës d'ozone, cette perte initiale de photosynthèse peut être suivie d'une mort cellulaire entraînant des lésions apparentes sous formes de lésions nécrotiques, ces pathologies étant normalement provoquées par des agents pathogènes viraux et microbiens. Ainsi, à terme, l'ozone est responsable d'une réduction significative de la productivité agricole et de la biomasse.

3 Normes et seuils recommandés pour la pollution à l'ozone

Compte tenu de sa dangerosité pour l'homme et pour l'environnement, l'ozone fait partie des différents gaz inclus dans les programmes de surveillance de la qualité de l'air en Europe. En France, c'est avec la loi LAURE (Loi sur l'Air et l'Utilisation Rationnelle de l'Energie), adoptée en décembre 1996 et qui stipule que « tout citoyen doit pouvoir être en mesure de respirer un air qui ne nuise pas à sa santé », que se sont développés les différents organismes et politiques de surveillance de la qualité de l'air. En effet, cette loi implique la mise en place de système de mesure, de surveillance et de prévision de la

qualité de l'air afin de pouvoir tenir informer les citoyens et les alerter en cas de pic de pollution. Cette loi a également permis de définir des seuils de concentration en polluant acceptables et de mettre en place des mesures de lutte contre la pollution notamment en cas de forts pics (diffusion de messages de prévention, mise en place de la circulation alternée, interdiction d'entrée des camions dans les agglomérations, protection des enfants et personnes sensibles, etc.). En France, les normes et donc les seuils de concentrations maximums en ozone acceptables sont les mêmes que ceux fixés par l'union européenne. Ils sont résumés dans le tableau 1.

	Valeur cible	Seuil de recommandation et d'information	Seuil d'alerte
Normes sur l'O ₃ (µg/m ³)	120 µg/m ³ pour le max journalier en moyenne sur 8h à ne pas dépasser plus de 25 jours sur une année	180 µg/m ³ en moyenne horaire	240 µg/m ³ en moyenne horaire
Normes sur l'O ₃ (équivalent en ppb)	60 ppb	90 ppb	120 ppb

Tableau 1 : Normes européennes et françaises sur l'exposition à l'O₃ (Données AASQUA AIRPARIF)

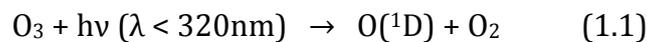
La valeur cible est le niveau à atteindre, dans la mesure du possible et dans un délai de temps donné, pour lequel les effets nocifs sur la santé humaine ou l'environnement sont faibles voire négligeables. Le seuil de recommandation et d'information est le niveau au-delà duquel une exposition de courte durée présente un risque pour la santé des personnes les plus sensibles (enfants, personnes âgées et personnes ayant des troubles respiratoires) et à partir duquel des messages d'alerte et de recommandations sont communiqués à la population. Le seuil d'alerte est le niveau au-delà duquel une exposition de courte durée présente un risque pour la santé de l'ensemble de la population ou un risque de dégradation de l'environnement, ce qui justifie la mise en place des diverses mesures d'urgence citées plus tôt.

Au sein des pays membres de l'union européenne, la surveillance de la qualité de l'air et du bon respect des normes, est généralement effectué par des services spécialisés des organismes d'états (ministère de l'environnement ou équivalent). En France, la surveillance de la qualité de l'air est confiée aux Associations Agréées à la Surveillance de la Qualité de l'Air (AASQA). Il existe au moins une AASQA pour chaque région administrative française. Pour effectuer ces missions, elles disposent d'un ensemble de stations de mesure au sol réparties dans et autour des zones de fortes densités de population et qui forment ainsi des réseaux. Ces réseaux de stations, en plus de devoir couvrir la plus grande surface possible, sont également disposés de manière à représenter au mieux les différents types de configuration de terrain (station urbaine,

semi-urbaine et rurale). Ainsi, ces organismes de surveillance de la qualité de l'air mesurent en continu (une mesure toutes les 15min) les concentrations de certains polluants réglementés dont l'O₃ et informent quotidiennement les citoyens notamment en cas de pic de pollution.

4 Cycle de l'ozone troposphérique

L'ozone est un rouage important dans le processus d'oxydation troposphérique puisque sa photodissociation est une des sources principales de radicaux OH dans la troposphère, qui joue le rôle de « détergent » en réagissant avec la plupart des espèces oxydables émises.



où O(¹D) est un atome d'oxygène dans un état électronique excité.

C'est une espèce secondaire, c'est à dire produite chimiquement dans l'atmosphère. Elle est relativement stable puisque son temps de vie moyen est de l'ordre de quelques semaines.

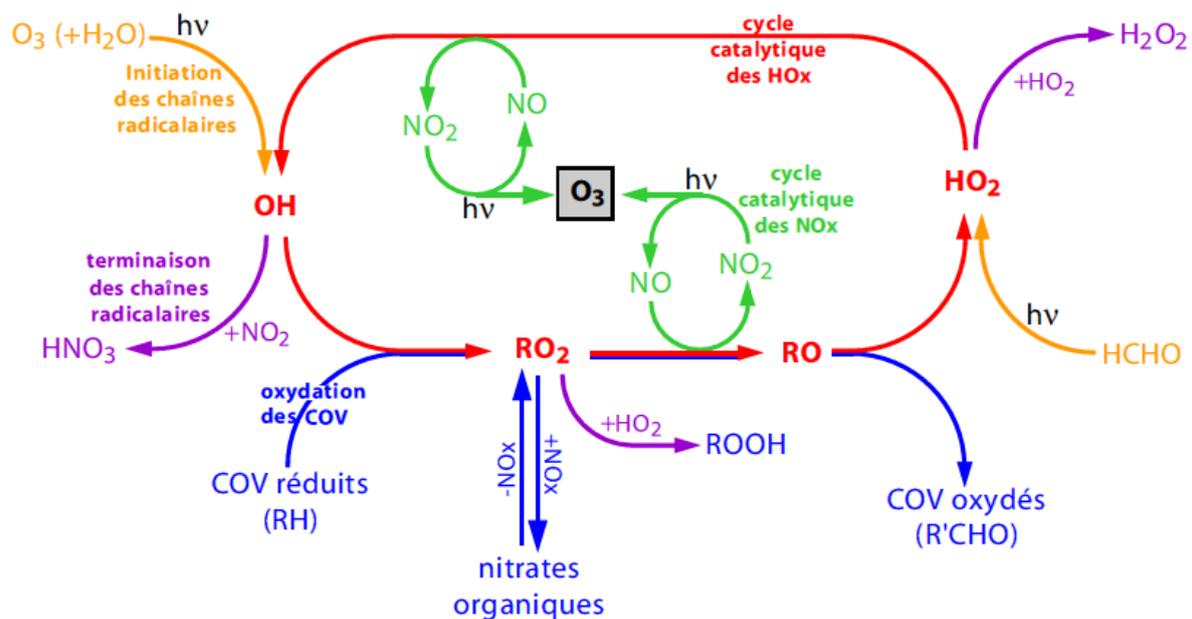


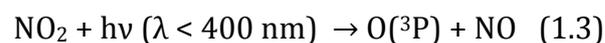
Figure 2 : Schéma des principaux mécanismes impliqués dans la formation de l'O₃ troposphérique (Aumont et al. 2005)

Sa source majeure dans la troposphère provient de l'oxydation photochimique des composés organiques volatils (COV) en présence d'oxydes d'azote (NO_x). La famille des COV regroupe plusieurs centaines d'espèces différentes, principalement des hydrocarbures d'origine primaire émis à près de 90% par des sources naturelles.

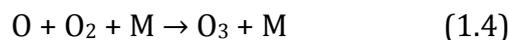
L'oxydation des COV va entraîner la production des radicaux peroxy (RO_2) impliqués dans les mécanismes de formation de l'ozone troposphérique (cf. figure 2). Le temps de vie des COV va varier selon les espèces, allant des quelques heures pour les plus réactifs à plusieurs années pour les plus stables. Autre espèce impliquée fortement dans le cycle de l'ozone, la famille des HO_x regroupe quant à elle non seulement les radicaux OH et HO_2 mais également l'ensemble des radicaux peroxy organiques RO_2 . Ils assurent la conversion de NO en NO_2 . La famille des NO_x regroupe elle deux espèces distinctes, NO et NO_2 , fortement couplés du fait la rapidité de la réaction $NO + O_3 \rightarrow NO_2 + O_2$. Ils sont principalement émis sous la forme de NO suite à la rupture des liaisons chimiques de N_2 par une source suffisamment énergétique, comme une combustion ou un éclair, ou encore par libération de l'azote présent dans les combustibles. Les sources majoritaires de NO_x sont anthropiques et sont liées à la combustion de fuel fossile et de biomasse. Leur temps de vie chimique est typiquement de l'ordre de la journée.

Ainsi, la famille des COV et celle des NO_x , présentes naturellement dans la troposphère mais également émises par l'activité humaine, représentent les principaux précurseurs chimiques de l' O_3 , auxquelles il est nécessaire d'ajouter la famille des radicaux HO_x qui contrôle le temps de vie des COV et NO_x . Les radicaux HO_x , et tout particulièrement OH, sont des espèces extrêmement réactives, leur temps de vie étant de l'ordre de la seconde, ils sont donc présents dans la troposphère en quantité d'ultra trace. De plus, leurs principales sources sont liées à des réactions photochimiques. Donc les réactions associées à la production d'ozone (cf. figure 2) sont essentiellement des processus diurnes.

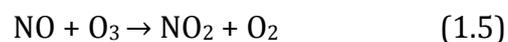
Le seul processus chimique de formation de l'ozone est l'oxydation du dioxygène (O_2) en présence d'un troisième composé. Cela nécessite la présence d'oxygène atomique (O) obtenu par photodissociation de NO_2 à des longueurs d'onde inférieures à 400nm. On a donc :



où $O(^3P)$ est un atome d'oxygène dans l'état fondamental 3P .



Le NO réagit également très rapidement avec O_3 :



En atmosphère non polluée, il existe donc un équilibre dynamique entre les NO_x et l'ozone, les concentrations de NO et NO_2 ne sont pas modifiées et l'ozone n'est pas formé en surplus.

4.1 Les régimes chimiques associés à la production/consommation de l'ozone

Il existe donc un équilibre dynamique naturel entre les NO_x et l'ozone. Mais au sein d'une atmosphère polluée, d'autres corps chimiques permettent d'oxyder le NO en NO_2

sans consommer d'O₃; l'équilibre est alors rompu et les concentrations d'ozone augmentent.

Ainsi, parmi les trois principaux précurseurs de l'ozone troposphérique, c'est la charge en NO_x du milieu considéré qui joue un rôle prépondérant dans la production d'ozone. La figure 3 présente le profil type de la production d'ozone d'un milieu en fonction de sa charge en NO_x. Comme le temps de vie des NO_x est de l'ordre de la journée et donc que c'est un composé qui se retrouve proche de ses sources, une échelle représentant les différentes situations environnementales, et donc la proximité ou non à ces sources, a été ajoutée. On distingue ainsi deux régimes chimiques différents, dont la zone de transition correspond à une concentration en NO_x de l'ordre de quelques ppb. Il y a tout d'abord un régime dit « limité en NO_x » où la production d'ozone augmente avec la concentration en NO_x et un deuxième régime dit « saturé en NO_x » où cette fois-ci la vitesse de production de l'ozone diminue avec le contenu en NO_x.

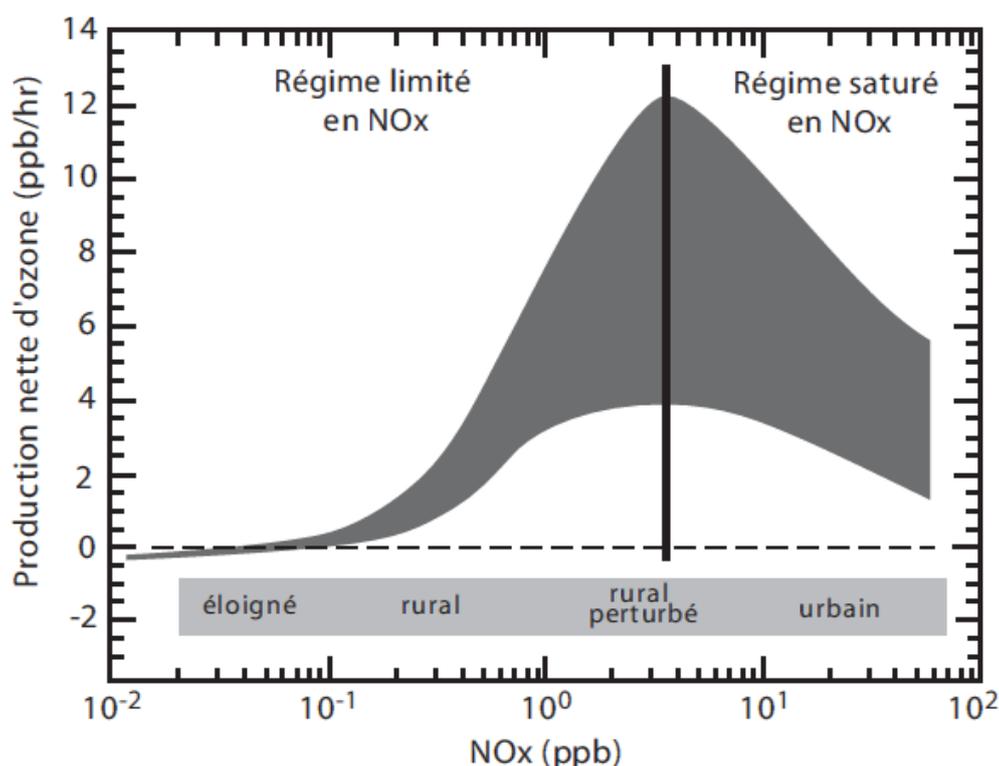


Figure 3 : Profil type de l'évolution de la production d'O₃ en fonction de la quantité de NO_x (Aumont et al. 2005)

4.1.1 Régime chimique saturé en NOX

Lorsque la concentration d'un milieu en NO_x est supérieure à quelques ppb, la réaction d'oxydation des COVs par les radicaux OH, qui permet par la suite la production d'O₃, va être secondaire, les radicaux OH réagissant préférentiellement avec le NO₂. L'oxydation des COVs ralentit et le NO est donc oxydé en NO₂ en consommant de l'O₃; on a donc un puits d'O₃. Dans ce régime chimique, les NO_x sont donc inhibiteurs de la production

d'ozone. Cette situation correspond aux conditions rencontrées dans les atmosphères urbaines et périurbaines.

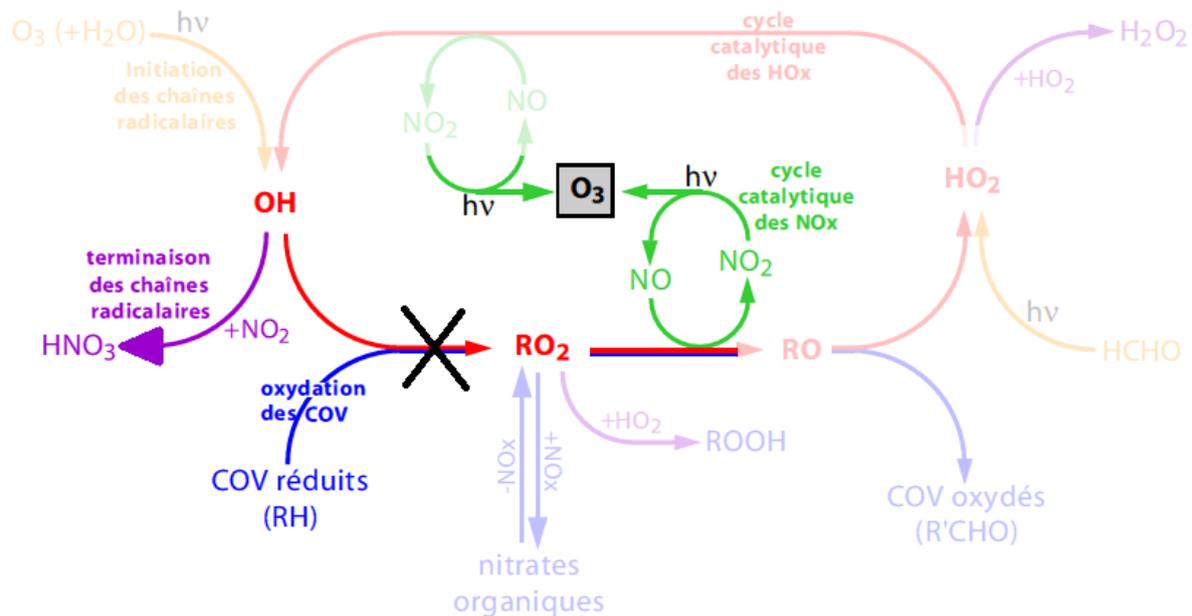


Figure 4 : Evolution du cycle de vie de l'ozone troposphérique pour un régime chimique saturé en NO_x (Aumont et al. 2005)

4.1.2 Régime chimique limité en NO_x

Pour ce régime chimique, on peut distinguer deux cas de figure qui dépendent directement du taux de NO_x du milieu.

Tout d'abord, pour les milieux modérément riches en NO_x (quelques dizaines de ppt < NO_x < quelques ppb), les radicaux OH vont ici très majoritairement oxyder les COVs, ce qui va dans le sens de la formation de l'ozone. Cependant, contrairement au régime saturé en NO_x, les concentrations en NO sont insuffisantes pour réagir avec tous les peroxydes RO₂ formés. Ainsi, il y a une compétition entre les réactions impliquées dans la formation de l'ozone et les réactions RO₂ + HO₂ et HO₂ + HO₂ (cf. figure 5). Dans ce cas de figure, la vitesse de production de l'ozone va croître avec l'augmentation de la concentration du milieu en NO et donc en NO_x. Mais les NO_x étant quantité faible, le système chimique va notamment être très sensible aux mécanismes de formation/destruction des nitrates organiques, qui consomme ou forme des NO_x.

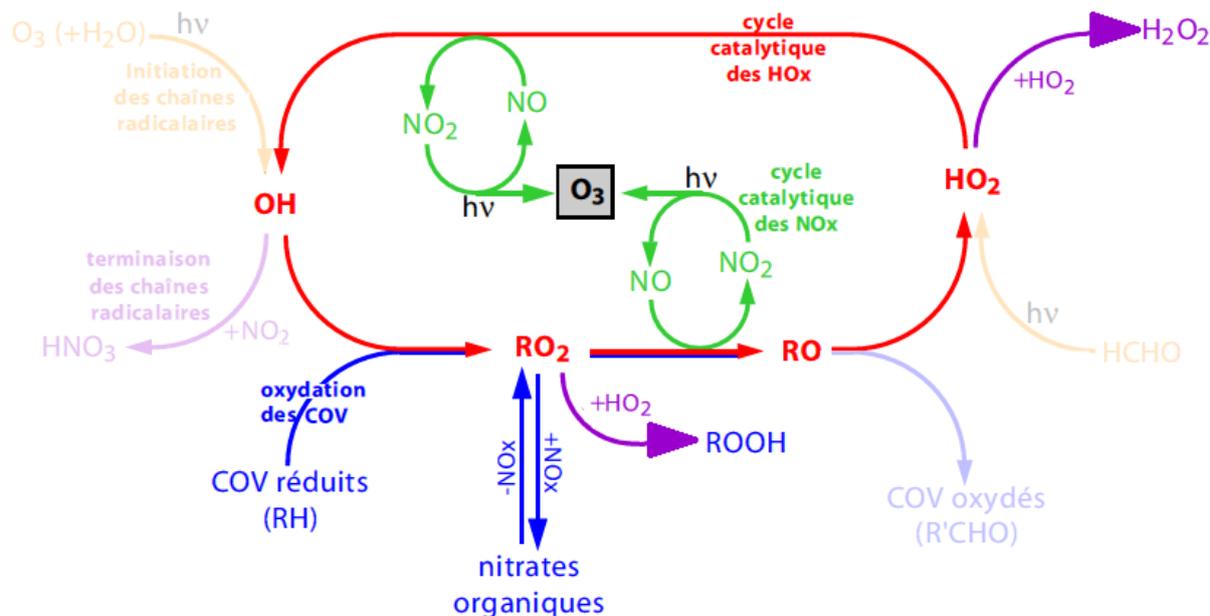


Figure 5 : Evolution du cycle de vie de l'ozone troposphérique pour un régime chimique limité en NO_x (Aumont et al. 2005)

Pour le cas des milieux pauvres en NO_x (NO_x < quelques dizaines de ppt), l'évolution des radicaux peroxy va être dominée par les réactions RO₂ + HO₂ → ROOH + O₂ et HO₂ + HO₂ → H₂O₂. L'ozone consommé par photolyse (réaction 1.1) n'est pas intégralement régénéré par le mécanisme réactionnel (cf. figure 6). Dans ce régime, le recyclage des HO_x est par ailleurs en partie assuré par l'ozone, en particulier selon :

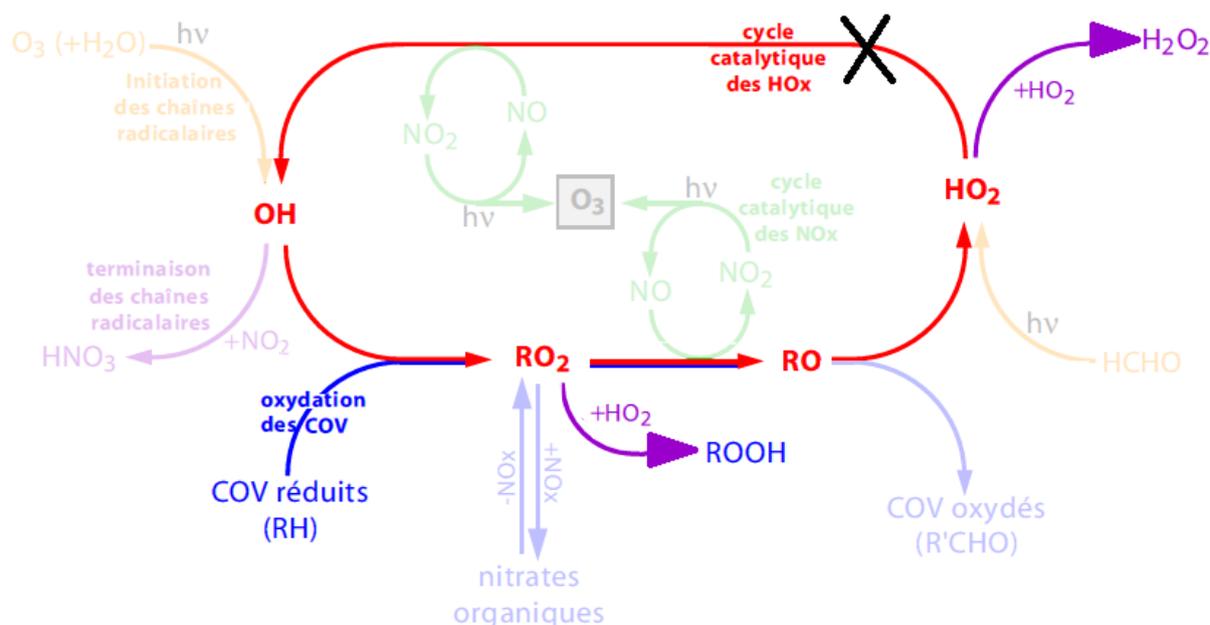
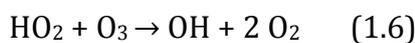


Figure 6 : Evolution du cycle de vie de l'ozone troposphérique pour un régime chimique très limité en NO_x (Aumont et al. 2005)

Dans ce régime, l'oxydation atmosphérique induit une consommation d'ozone. Ce cas correspond à la chimie des zones éloignées de sources primaires (zone océanique en particulier).

4.2 Cycle de vie de l'ozone dans un panache urbain

Pour observer les conséquences de ces différents régimes chimiques sur le bilan d'ozone dans un panache, intéressons nous à un cas de pollution proche d'une grande agglomération urbaine.

Dans ce cas de figure, nous avons à la fois de nombreuses sources de COVs et des niveaux de concentrations en NO_x élevées (de l'ordre de plusieurs dizaines de ppb). On se trouve donc dans le cas de régime chimique saturé en NO_x . Ainsi, s'il n'y a pas de condition météorologique amenant à une accumulation d'ozone (« couche d'inversion » et vents faibles), la production d'ozone est très lente et les concentrations excèdent rarement la centaine de ppb. Puis, en s'éloignant du centre urbain, la parcelle d'air va s'appauvrir en NO_x , du fait de leur faible temps de vie et de l'absence de fortes sources en zone rurale. Ainsi, on va passer d'un régime chimique saturé en NO_x à un régime limité en NO_x . La vitesse de production de l'ozone va donc augmenter ainsi que sa concentration.

Les maximas de concentration en ozone ne sont donc généralement pas observés dans les zones ayant d'importantes sources de précurseurs mais plutôt à quelques dizaines de kilomètres dans les zones situées sous le vent des grandes agglomérations.

4.3 Transports et dépôts au sol

L'origine première de l'ozone troposphérique est donc l'ensemble des réactions photochimiques, énoncées précédemment, amenant à sa formation (environ 80% de l'ozone troposphérique). Mais l'ozone est également présent dans la stratosphère et l'inclusion d'air stratosphérique constitue ainsi une autre source d'ozone troposphérique (environ 20%). En effet, il est possible que des masses d'air provenant de la stratosphère, riche en ozone, traversent la tropopause qui délimitent les deux couches atmosphériques, et se diluent dans la troposphère en l'enrichissant donc en ozone (Zoogman et al., 2014).

Enfin, le dernier phénomène, qui représente cette fois un puits d'ozone, est le dépôt sec à la surface, qui va entraîner soit une décomposition thermodynamique donc le bilan s'écrit $2 \text{O}_3 \rightarrow 3 \text{O}_2$, soit une absorption de l'ozone par la végétation, qui dépend fortement du type de plante et de son activité métabolique.

5 Mesure de l'ozone troposphérique

Afin de pouvoir lutter contre la pollution à l'ozone, il est nécessaire de mieux connaître l'évolution des concentrations ainsi que les différents processus associés à la production et à la destruction de ce polluant. Cela implique d'être capable de mesurer ces concentrations à une résolution spatio-temporelle proche voire meilleure que la variabilité des concentrations en O_3 . De plus, cette surveillance doit se faire à l'échelle globale et couvrir toute les zones géographiques où l'homme est présent, avec en priorité les zones de forte densité de population mais également les zones peu, voire non peuplées afin de pouvoir observer et étudier le transport de l' O_3 .

Ainsi, on distingue deux types de moyens de mesure de l' O_3 , les mesures in situ et les mesures par télédétection.

5.1 Les mesures in situ

La mesure in-situ de l' O_3 est réalisée sur place où le capteur va analyser uniquement la masse d'air qui l'entoure. Ce moyen permet d'obtenir des mesures régulières et un suivi en continu d'une zone donnée, mais a donc une représentativité spatiale limitée. Il existe différents types de capteurs in situ pour mesurer l' O_3 :

- a) **Analyseur par colorimétrie** : Comme son nom l'indique, cette méthode consiste à faire passer l'échantillon d'air dans un tube qui contient un réactif dont la couleur va changer en fonction de la concentration de l'espèce chimique associées. L'estimation de la concentration se fait ensuite grâce à une échelle colorimétrique. C'est la méthode la plus simple et la moins coûteuse mais elle manque de précision et nécessite plusieurs minutes pour effectuer une seule mesure.
- b) **Sonde électrochimique** : Cette méthode de mesure s'appuie également sur la variabilité du comportement d'un réactif en présence de l'espèce chimique à mesurer. Elle consiste donc à faire passer l'échantillon d'air à analyser dans un tube contenant le réactif qui cette fois-ci va, au contact de l'espèce chimique à analyser, créer un léger courant électrique dont l'intensité va varier en fonction de la concentration de l'espèce. La mesure du courant électrique permet ainsi d'estimer la concentration de l'espèce. Cette mesure peut se dérouler en continu tant que le tube contient du réactif, permettant ainsi un suivi en continu de l'évolution des concentrations. Cependant, si l'on souhaite un appareil performant avec une durée de vie importante, le coût devient assez élevé. De plus, la précision de la mesure peut être entachée par une sensibilité non négligeable du réactif à d'autres gaz et il est nécessaire de changer le réactif périodiquement. Ces types de sondes sont lancées régulièrement (environ une fois par une ou deux semaines) depuis des nombreux sites dans le globe (au moins une cinquantaine) pour mesurer les profils verticaux d'ozone entre la surface et 20 à 30 km d'altitude (voir par exemple le réseau de mesures WOUDC <https://woudc.org/>) et ses mesures sont souvent utilisées pour valider les mesures satellitaires.

- c) **Capteur à semi-conducteur** : Cette méthode consiste également à analyser un courant électrique afin d'estimer la concentration de l'espèce analysée. Mais cette fois, on utilise une pièce de matériau semi-conducteur dont les caractéristiques varient en fonction de la concentration de l'espèce chimique. Les capteurs actuels sont munis de couches protectrices sélectives qui diminuent leurs sensibilités aux autres gaz, et ont des temps de réponses rapides (quelques dizaines de secondes), ce qui permet d'assurer des mesures précises dans le temps.
- d) **Analyseur à absorption spectrale** : Cette méthode de mesure de l'ozone utilise la propriété d'absorption de la molécule dans l'UV. En effet, l'ozone a un maximum d'absorption à 254 nm, maximum qui coïncide avec le maximum d'émission d'une lampe à basse pression de mercure. De plus, peu de molécules présentes dans l'atmosphère à des concentrations significatives absorbent à cette longueur d'onde. Cette méthode de mesure se base donc sur l'atténuation du rayonnement UV émis par la lampe à mercure lorsque l'échantillon contient de l'ozone. Une autre mesure est effectuée simultanément avec un échantillon qui ne contient pas d'ozone. Ensuite, on applique la loi de Beer-Lambert afin de quantifier la concentration d'ozone.

$$I = I_0 \times e^{-l\sigma C} \quad (1.7)$$

Donc

$$C = \frac{1}{\sigma l} \times \ln \left(\frac{I_0}{I} \right) \quad (1.8)$$

Où C est la concentration d'ozone, l la longueur du parcours optique, σ la surface d'absorption pour l'ozone à 254 nm, I l'intensité du rayonnement UV mesurée sur l'échantillon contenant de l'ozone et I_0 l'intensité du rayonnement UV mesurée en absence d'ozone. L'unité de mesure est le ppb ou le $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

Cette méthode de mesure de l' O_3 est de loin la plus coûteuse, mais a l'avantage d'être extrêmement précise et rapides (moins d'une seconde pour une mesure). C'est ce type de capteur qui est utilisé dans les réseaux de stations de mesure des AASQAs.

Au final, le choix du capteur à utiliser est un compromis entre la qualité, la précision et la vitesse d'acquisition des mesures souhaitées et le coût d'achat et de mise en opération de l'appareil.

Ces capteurs sont donc généralement installés à bord de stations fixes dites stations sol mais ils peuvent être embarqués à bord de ballons ou d'avions pour réaliser des mesures dites aéroportées, pour ainsi obtenir des mesures plus étendues spatialement que dans le cas des stations fixes. Ces mesures aéroportées permettent de mieux connaître la stratification et la dynamique des masses d'air qui sont des prérequis pour espérer améliorer sensiblement les modèles de qualité de l'air. Les capteurs embarqués à bord de ballon permettent d'obtenir des mesures de l'ozone sur le parcours aléatoire du ballon jusqu'à une altitude comprise entre 10 et 35 km d'altitude selon la hauteur où il éclate. Dans le cas des mesures avions, les matériaux embarqués pouvant être plus nombreux et plus lourds, les mesures sont plus précises et effectuées sur un parcours et

une trajectoire choisie par l'opérateur. Cependant, ce type de mesure est plus rare, car plus coûteuse, et est donc presque essentiellement effectuée lors de campagnes scientifiques dédiées. La France dispose d'une flotte d'avions volant à 12km d'altitude dédiée à ce type d'opération avec la flotte SAFIRE (Service des Avions Français Instrumentés pour la Recherche en Environnement).

Il existe également d'autres types de mesures in-situ, mais elles sont plutôt qualitatives puisqu'elles ne permettent pas d'obtenir une mesure de la concentration d'ozone. En effet, certaines méthodes de mesure se basent sur l'impact qu'à l'ozone sur les plantes, avec le phénomène de nécrose des feuilles et la réduction du rendement des plantes. Par exemple, au sein de l'université de Créteil mais également à divers lieux dans le département, des cultures de haricots bioindicateurs, sensible à l'O₃, ont été installées. Dans ces cultures sont plantés une variété de référence de haricots, résistante à l'ozone et une variété bio indicatrice hypersensible au polluant. Ainsi, en comparant les deux variétés par rapport aux dommages sur les feuilles et à l'importance ou non de la récolte, on peut avoir une information qualitative non seulement de l'impact de l'O₃ sur les plantes mais également de la présence d'O₃ dans ces lieux.

5.2 La télédétection de l'ozone atmosphérique

L'ozone troposphérique peut être aussi mesuré par télédétection ou mesure dite « à distance ». La télédétection consiste à mesurer à distance l'atmosphère et ses composants en utilisant les caractéristiques du rayonnement qui s'y propage. En effet, le rayonnement interagit avec les espèces chimiques présentes dans l'atmosphère, qui chacune réagissent différemment selon la longueur d'onde du rayonnement utilisé. Les domaines spectraux utilisés sont variés et vont de l'ultraviolet aux ondes radio. Ainsi, en mesurant le rayonnement, on peut obtenir une information indirecte sur les concentrations des espèces chimiques étudiées. Cette méthode de mesure à distance permet d'obtenir des profils de concentrations des composés étudiés et permet donc une meilleure couverture spatiale que les mesures in-situ. Il existe deux types de télédétection : la télédétection passive où l'on utilise une source de rayonnement externe comme le rayonnement solaire ou le rayonnement infrarouge de la surface, et la télédétection active où la source de rayonnement est incluse dans le système d'observation et est donc artificielle.

Les mesures de télédétection passive sont réalisées à l'aide de spectromètre. Les spectromètres sont des instruments capables de décomposer la lumière incidente en raies spectrales, mesurant ensuite la quantité de rayonnement présente dans chacune de ces raies. Ainsi, en connaissant les raies spectrales pour lesquelles le composé atmosphérique étudié est sensible, on peut remonter à sa concentration. La performance d'un spectromètre se juge par la précision de la mesure de la quantité de photons appartenant à une raie spectrale donnée, ainsi que par la finesse de ses raies spectrales. Les mesures de télédétection active sont elles réalisées par des LiDARs (Light Detection And Ranging) ou des RADAR (RADio Detection And RAgging) pour les rayonnements dans les longueurs d'onde radio. Ces appareils fonctionnent sur le même principe. Si on prend l'exemple du LiDAR, son principe est basé sur l'émission active de photons dans l'atmosphère au moyen d'un laser pulsé puis sur la mesure des photons rétrodiffusés par l'atmosphère et ce qui la compose. Ensuite, en analysant les caractéristiques de

l'émission et des photons rétrodiffusés, on peut calculer les valeurs des différents composés et paramètres atmosphériques.

Les mesures par télédétection peuvent être réalisées à partir d'appareils installés à la surface, qui vont ainsi sonder les masses d'air qui les survolent, mais ils sont également embarqués à bord d'avions (comme la flotte SAFIRE) ou de satellites, ce qui permet une meilleure couverture spatiale.

L'analyse depuis l'espace de l'atmosphère permet aujourd'hui d'obtenir des mesures journalières avec une vaste couverture spatiale, aux échelles régionale, continentale et globale. De plus, la télédétection satellite permet de répondre à des enjeux à la fois scientifiques, économiques et stratégiques, ce qui explique le fort engouement des nations pour cette méthode d'observation et donc le nombre croissants de satellites.

Pour l'observation de l'atmosphère, on peut distinguer deux types de visée satellite :

- **La visée au limbe**, soit lorsque le satellite a une visée tangente à l'atmosphère (voir figure 7). Ce mode de visée permet d'obtenir une résolution verticale fine mais aussi une résolution horizontale plus grossière. De plus, en visant au limbe, on ne peut pas mesurer les couches les plus basses de l'atmosphère.

- **La visée au nadir**, soit lorsque le satellite vise la surface de la Terre (voir figure 7). Ce mode de visée permet au contraire d'avoir une fine résolution horizontale, mais une résolution verticale plus grossière. Pour le cas de l'observation de l'O₃, afin d'obtenir des informations sur les concentrations mesurées sur la verticale, on observe dans le cas du rayonnement IR la forme des raies d'absorption du spectre obtenue et dans le cas du rayonnement UV la hauteur de pénétration du spectre, qui va varier selon la longueur d'onde.

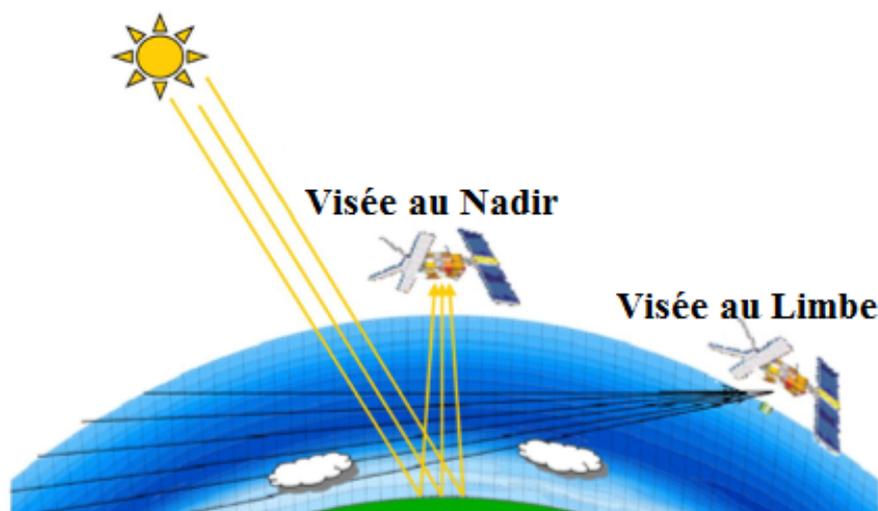


Figure 7 : Schéma descriptif des deux types de visée satellitaire

Lorsque l'on parle d'observations satellitaires, il est également nécessaire de différencier deux types d'orbites :

- a) **L'orbite basse** qui est une orbite circulaire se situant entre 300 et 1000 km d'altitude. Souvent, les satellites à orbite basse ont également une orbite polaire

héliosynchrone. L'orbite est dite polaire lorsque son inclinaison est proche de 90° , ce qui la fait passer au-dessus ou près des pôles. Les orbites héliosynchrones permettent elles de passer toujours à la même heure solaire au-dessus d'un même point donné. Si ce type d'orbites offre de nombreux avantages pour la surveillance de la qualité de l'air, pour pouvoir survoler un point d'étude toutes les heures, intervalle de mesure conseillé si l'on souhaite mesurer l'évolution des polluants précisément, il faudrait lancer une quinzaine de satellites en orbites basses.

- b) **L'orbite géostationnaire** est une orbite circulaire située dans le plan de l'équateur à une altitude de 35786 km. Cette altitude a été fixée, puisqu'à cette altitude, un satellite a une période de révolution identique à celle de la Terre. Ainsi, le satellite survole et surveille la même zone. De plus, si la perte de flux de données est plus importante dans le cas des satellites géostationnaires que dans celui des satellites à orbites basses du fait de l'altitude élevée, le fait de survoler en permanence la même zone permet de réaliser des mesures avec un temps d'intégration beaucoup plus long. En utilisant plusieurs satellites géostationnaires, on peut ainsi couvrir l'ensemble de la surface du globe, à l'exception des pôles. Cependant, du fait de leur altitude importante, la mise en orbite d'un satellite géostationnaire nécessite un lanceur puissant et est donc très coûteuse.

Par la suite, nous verrons, dans un aperçu non exhaustif, différents capteurs, utilisés historiquement, de nouvelle génération et futures, pour mesurer de l' O_3 par satellite et classés selon leur domaine spectral de fonctionnement.

5.2.1 Mesures satellitaires dans l'UV

Dans l'UV, l'ozone absorbe principalement dans les bandes de Hartley et de Huggins, respectivement comprise entre 200 et 300 nm et entre 320 et 360 nm. Mais d'autres composés atmosphériques, comme le NO_2 , le SO_2 , le HCHO absorbent également dans ses longueurs d'onde et peuvent ainsi perturber la détection de l' O_3 . Les autres facteurs qui s'ajoutent à la qualité de la restitution de l' O_3 sont entre autre le bruit radiométrique du capteur qui impacte la précision de la mesure, mais également la résolution spectrale et spatiale du capteur.

L'instrument **TOMS** (« Total Ozone Mapping Spectrometer ») a été mis en orbite pour la première fois en 1978 à bord du satellite Nimbus 7. Il avait alors contribué entre 1978 et 1993 au travers de 4 générations d'instruments TOMS, à une meilleure compréhension de l'ozone stratosphérique en fournissant des mesures quotidiennes. Il a notamment permis d'observer la formation et l'évolution du trou de la couche d'ozone au-dessus de l'Antarctique chaque année entre Septembre et Novembre. Les progrès technologiques ont permis à TOMS d'être à nouveau utilisé sur d'autres satellites afin de pouvoir détecter également l'ozone troposphérique et donc de mesurer la colonne totale d'ozone.

L'instrument **GOME** (« Global Ozone Monitoring Experiment ») lancé à bord du satellite ERS-2 en 1995 est un spectromètre UV-VIS (de 240 à 790 nm) de résolution spatiale de 40 km sur 320 km qui mesure la colonne totale d'ozone. Sa résolution

spectrale de 0,2 nm et son fort ratio signal/bruit dans les bandes de Hartley et de Huggins, bandes spectrales situées dans l'UV propices à la détection de l'O₃, ont permis de mesurer la distribution verticale de l'O₃ dans la troposphère (Chance et al., 1997, Liu et al., 2005). Il effectue 14 orbites par jour et couvre la Terre en 3 jours. GOME permet également la détection des nuages et la mesure de gaz traces et d'aérosols.

SCIAMACHY (Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Cartography) est un spectromètre embarqué à bord d'un satellite de l'ESA, ENVISAT, lancé en 2002. Il mesure à la fois au nadir et au limbe la lumière du soleil transmise, réfléchi et dispersée par des gaz traces dans l'atmosphère ou par la surface dans l'UV, le visible et le proche infrarouge (240 nm – 2380 nm). Il permet de mesurer les concentrations des gaz traces au sein de la stratosphère et de la troposphère. Pour obtenir des profils d'ozone, il scanne l'atmosphère notamment au limbe entre -3 et 92 km d'altitude, avec des intervalles verticaux de 3,3 km (E.J. Brinksma et al, 2004) mais également au Nadir.

L'instrument **OMI** (Ozone Monitoring Instrument) est présent sur le satellite Aura lancé en 2004, et qui avec Aqua et Terra forment une constellation de satellites appelé « A-Train ». C'est un spectromètre UV-VIS (de 270 à 500 nm) à résolution spatiale très fine (13 km * 25 km) (Liu et al, 2010). La figure 8 illustre les mesures d'ozone troposphérique avec OMI.

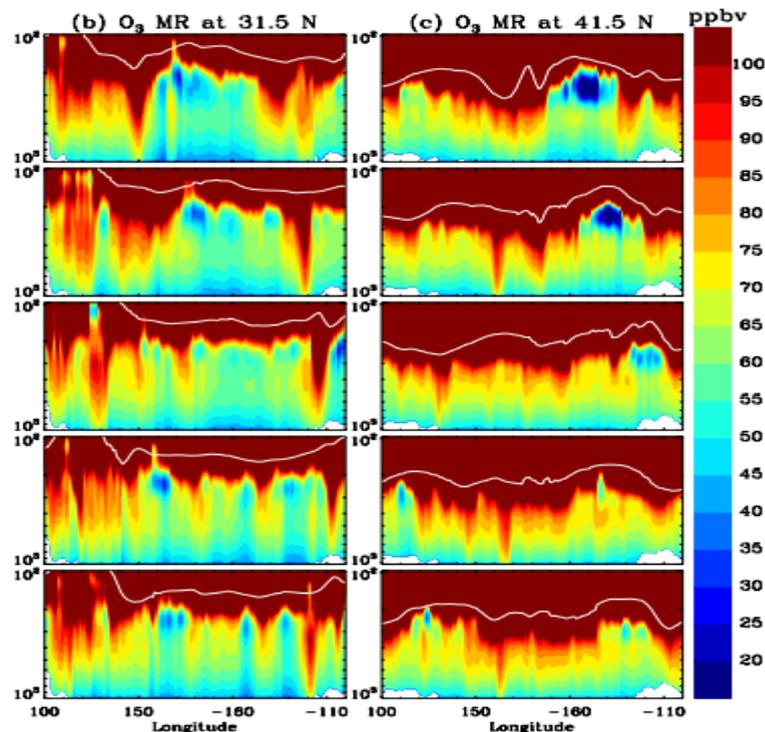


Figure 8 : Observation d'un événement de transport de pollution à l'ozone entre l'Asie de l'Est et les États-Unis entre le 5 et le 9 Mai 2006 obtenues à partir des mesures d'OMI (transects longitudinaux des profils d'O₃ à 31,5 et 41,5 ° Nord), (Liu et al., 2010)

L'instrument GOME a par la suite connu une deuxième génération avec la mise en orbite à bord de METOP-A en 2006 du spectromètre UV-VIS à visée au nadir **GOME-2**. Afin de garder une continuité dans les mesures effectuées par les divers instruments présents

à bord de ce satellite, un satellite similaire, METOP-B, a été lancé en 2012, et un troisième, METOP-C, sera lancé en 2018. Cette nouvelle version de GOME couvre la même gamme spectrale, de 240 à 790 nm, mais avec une résolution spectrale (0,24 – 0,29 nm dans l'UV pour GOME-2 contre 0,2 – 0,4 pour GOME) et une résolution spatiale, 80 km x 40 km, plus fines (Cai et al, 2012). GOME-2 est un deux capteurs spatiaux qui nous intéresse dans le cadre de cette thèse. La figure 9 présente les résultats que l'on peut obtenir vis à vis des concentrations en O₃ et de la hauteur de sensibilité maximum entre la surface et 6km d'altitude, lorsque l'on utilise les observations de GOME-2.

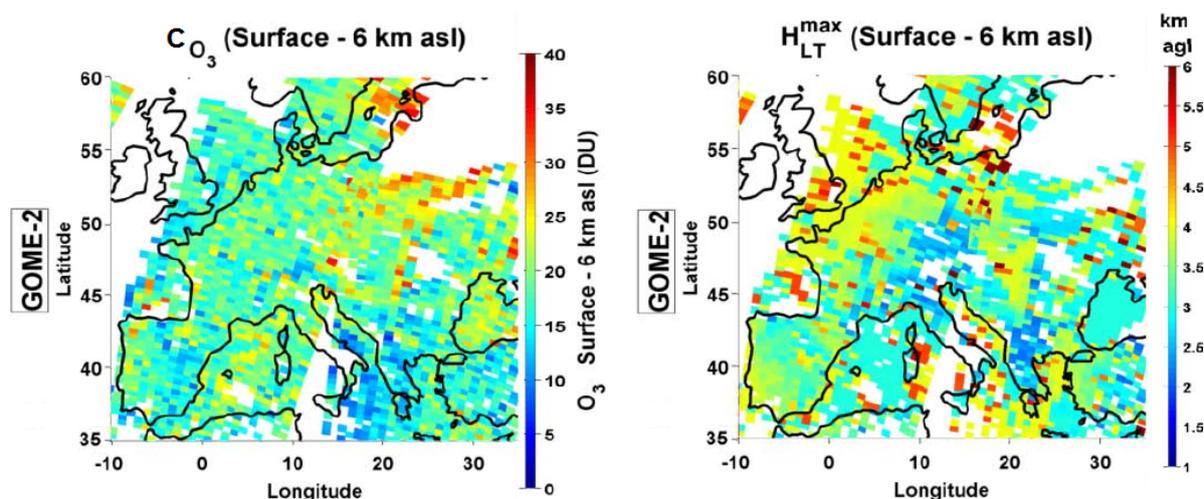


Figure 9 : Cartes de concentrations d'O₃ (gauche) et hauteurs maximales de détection de l'O₃ (droite) entre la surface et 6km d'altitude pour le 19/08/2009 au dessus de l'Europe obtenues à partir des mesures GOME-2 (Cuesta et al., 2013)

5.2.2 Mesures satellitaires dans l'IR

L'ozone absorbe dans l'infrarouge au-delà de 700 nm. A ces longueurs d'ondes, c'est la vapeur d'eau qui va fortement impacter la qualité de la restitution des concentrations en O₃, puisqu'elle absorbe également le rayonnement. De plus, les capacités du capteur ainsi que son rapport signal sur bruit ont également beaucoup d'impact sur la qualité de la mesure.

Embarqué à bord du satellite Aura tout comme OMI, **TES** (Tropospheric Emission Spectrometer) est un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier pouvant viser au nadir et au limbe. Il couvre une gamme spectrale allant de 650 à 3050 cm⁻¹ avec une résolution spectrale de 0,1 cm⁻¹ pour la visée au nadir et de 0,025 cm⁻¹ au limbe. Sa résolution spatiale au nadir est très fine, 5 km x 8 km (Worden et al., 2007), et TES effectue des scans toutes les 4 secondes. Il ne permet donc pas d'obtenir une carte de mesure complète des zones survolées.

IASI (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer) est, tout comme GOME-2, embarqué à bord des satellites Metop-A et Metop-B et le sera également sur Metop-C en 2018. Ses objectifs sont l'étude de la météorologie et la mesure de la composition atmosphérique. Ainsi, il permet de mesurer notamment la distribution spatiale de l'ozone, mais il fournit également des profils de température et d'humidité ainsi que des

informations sur les nuages. C'est un interféromètre qui mesure dans l'infrarouge thermique le rayonnement émis par la surface terrestre et l'atmosphère. C'est le deuxième capteur d'intérêt dans le cadre de cette thèse.

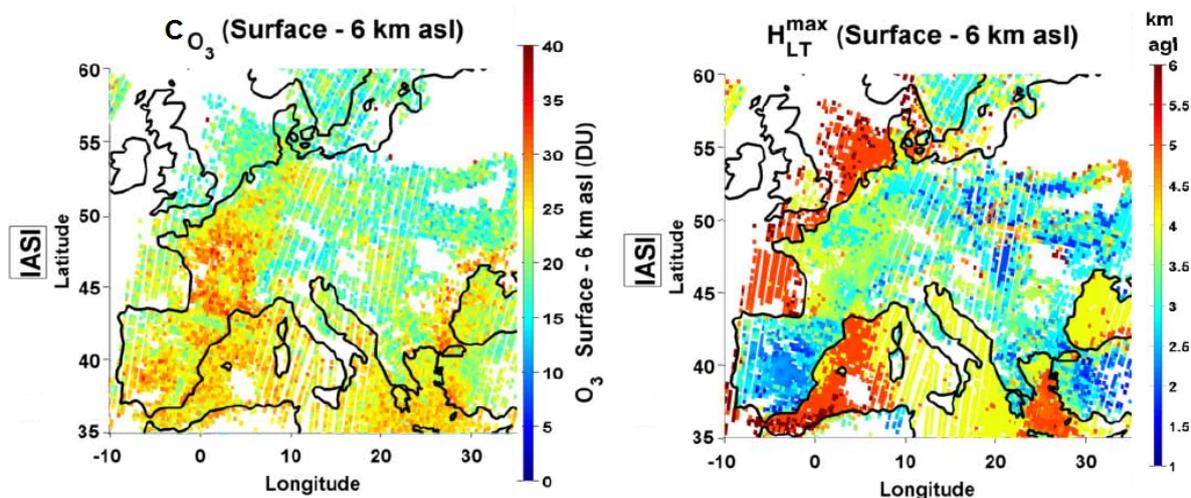


Figure 10 : Cartes des concentrations d'O₃ (gauche) et hauteurs maximales de détection de l'O₃ (droite) entre la surface et 6km d'altitude pour le 19/08/2009 au dessus de l'Europe obtenues à partir des mesures IASI (Cuesta et al., 2013)

La figure 10 présente les résultats que l'on peut obtenir vis à vis des concentrations en O₃ et de la hauteur de sensibilité maximum entre la surface et 6km d'altitude, lorsque l'on utilise les observations de IASI. On peut remarquer ici que la résolution spectrale que l'on obtient est plus fine que celle de GOME-2 (figure 9), on obtient donc une carte plus détaillée.

En utilisant des mesures d'O₃ effectuées par des capteurs spatiaux et limitée à un seul domaine spectral, il a été possible tout d'abord de mesurer la colonne totale d'ozone puis de différencier l'ozone stratosphérique de l'ozone troposphérique et ainsi d'obtenir des profils allant jusqu'à 3-4 km d'altitude (Eremenko et al., 2008; Dufour et al., 2010).

5.2.3 Synergie multispectrale actuelles des mesures satellitaires

Actuellement, aucune observation satellite issue d'un seul domaine spectral n'amène suffisamment d'informations pour restituer avec une précision suffisante les concentrations de l'ozone présent dans la couche limite atmosphérique, couche où se situe l'air que nous respirons. Il est donc impératif de développer des approches méthodologiques innovantes afin d'exploiter pleinement les capteurs spatiaux.

Le couplage multispectral, c'est à dire l'utilisation non plus d'un seul mais de plusieurs domaines spectraux de manière conjointe, offre un fort potentiel pour contourner ces limitations importantes dans l'application des observations satellitaires à l'étude de la pollution atmosphérique. Dans ce cas de figure, les capacités des deux capteurs ont également un impact important sur la qualité de la mesure. De plus, il est nécessaire que les deux capteurs mesurent la même zone en même temps ou dans un laps de temps très proche.

a) TES+OMI

Cette approche consiste donc à combiner les mesures dans l'IR du spectromètre TES avec les mesures dans l'UV de OMI, tous deux embarqués à bord du satellite AURA (Fu et al. 2013). Ainsi, étant embarqués à bord du même satellite, ils survolent et scannent les mêmes zones au même moment et repassent au-dessus du même lieu tous les 16 jours. Avec ce couplage à deux bandes spectrales, la résolution verticale est accrue tout comme la sensibilité à l'O₃.

b) IASI+GOME2

Cette nouvelle approche multispectrale, combinant deux fenêtres spectrales différentes, a été développée au LISA par l'équipe SPECAT que j'ai intégré dans le cadre de cette thèse. Elle permet d'observer l'ozone troposphérique en combinant à la fois les mesures dans le TIR observée par IASI et celles dans l'UV observées par GOME-2. Elle nécessite l'utilisation de modèles de transfert radiatif pour l'IR, KOPRA et pour l'UV, VLIDORT. Ces modèles, auxquels sont fournies certaines données de l'atmosphère observée (profil de température, profil de pression, diverses données de surface), vont donner respectivement un spectre dans le TIR et un spectre dans l'UV. Puis, en modifiant les différents paramètres qui influencent les mesures, on va chercher à se rapprocher le plus possible des spectres mesurés par IASI et GOME-2. Enfin, en utilisant une méthode d'inversion et connaissant les spectres d'absorption des différents composés atmosphériques à ces longueurs d'onde, on peut obtenir une estimation du profil d'ozone troposphérique (Rodgers, 2000). Il s'agit ici d'un résumé très succinct de cette méthode. Etant utilisée dans mon travail de thèse, elle sera expliquée plus précisément dans le prochain chapitre.

Ainsi, en utilisant cette méthode de couplage des spectres UV de GOME-2 et TIR de IASI, l'équipe du LISA a pu obtenir des mesures plus précises avec une sensibilité à l'ozone accrue et une hauteur de sensibilité maximum à l'ozone passant d'environ 3 km pour les cas avec un seul domaine spectral à 2,2 km pour cette méthode (Cuesta et al, 2013). Sur la figure 11, on peut voir que l'augmentation de la sensibilité à l'O₃ amenée par le couplage des bandes UV et TIR, associée à cette diminution de la hauteur de sensibilité maximum permettent d'observer des concentrations d'O₃ plus importantes que pour les cas avec la bande TIR seule (figure 10) et la bande UV seule (figure 9).

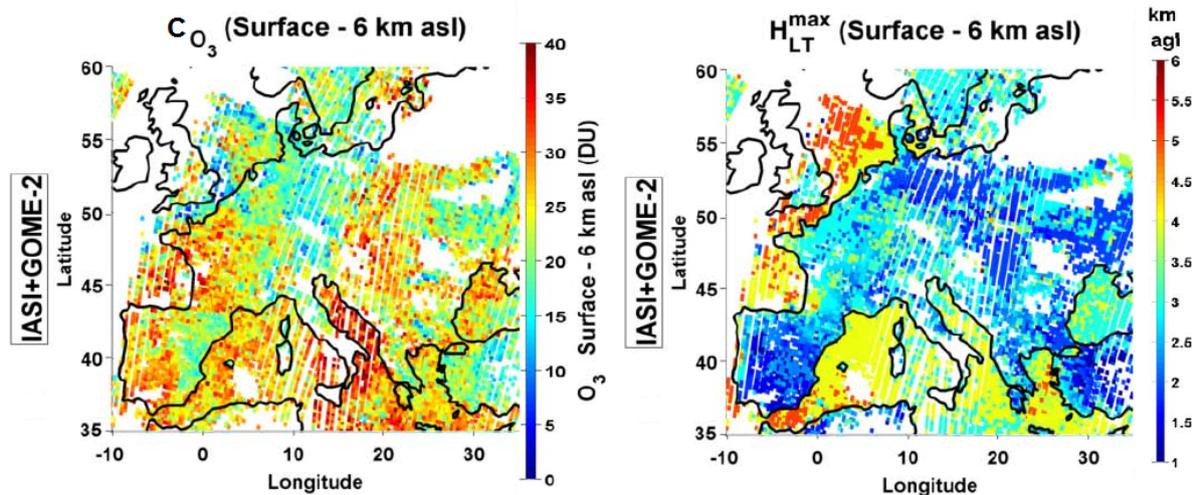


Figure 11 : Cartes des concentrations d'O₃ (gauche) et hauteurs maximales de détection de l'O₃ (droite) entre la surface et 6km d'altitude pour le 19/08/2009 au dessus de l'Europe obtenues à partir des mesures IASI et GOME-2 (Cuesta et al., 2013)

5.2.4 Synergie multispectrales futures

a) UVNS+IASI-NG

IASI-NG (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer – New Generation) et le spectromètre UVNS (UltraViolet Visible Near-Infrared Shortwave infrared) sont les prochaines générations de IASI et GOME-2. Embarqués à bord des futurs satellites EPS-SG (Eumetsat Polar System – Second Generation) dont le lancement est prévu courant 2022, ces appareils doivent assurer la continuité des mesures de la pollution autour du globe.

En comparaison avec IASI et GOME-2, IASI-NG aura un bruit radiométrique deux fois moins important que son prédécesseur et une résolution spectrale deux fois plus fine, tandis que UVNS aura un ratio signal sur bruit plus élevé que GOME-2, une résolution horizontale plus fine mais une résolution spectrale deux fois plus grossière.

Une étude a été menée afin de comparer à l'aide d'un simulateur d'observations les performances de IASI+GOME2 et celles du couplage IASI-NG+UVNS (Costantino et al., 2017) pour l'observation de l'ozone troposphérique. La figure 12 présente les résultats obtenus pour la journée du 8 juillet 2010.

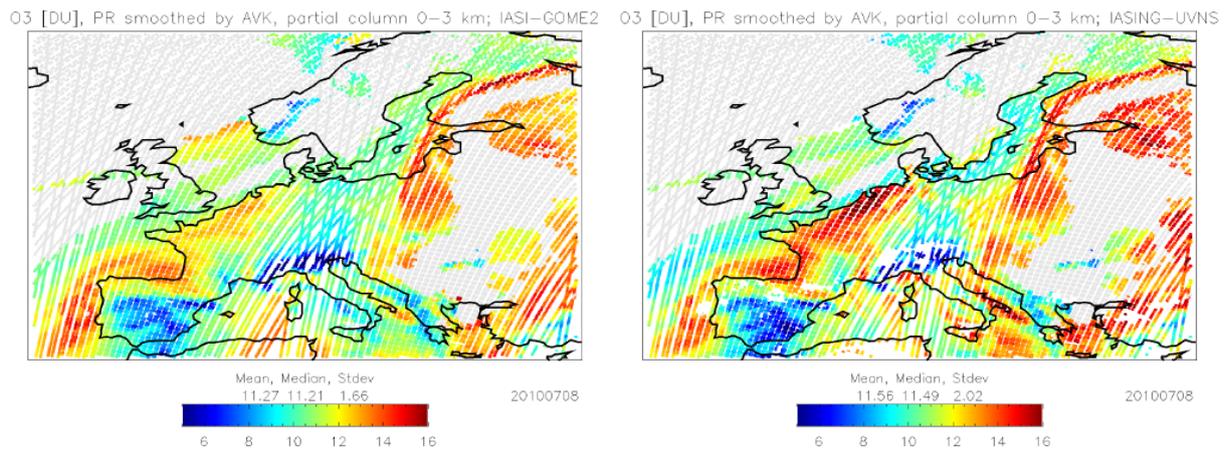


Figure 12 : Simulation des concentrations d'O₃ (0-3km) observées par IASI+GOME2 et IASI-NG+UVNS (Costantino et al., 2017)

b) MAGEAQ

MAGEAQ (Monitoring the Atmosphere from Geostationary orbit for European Air Quality) est un projet de satellite géostationnaire multispectral dédié à la surveillance de la qualité de l'air en Europe et notamment à la mesure de l'ozone et du monoxyde de carbone dans la basse-troposphère. Pour cela, il permet la restitution de l'ozone par couplage des mesures dans l'infrarouge thermique et le visible (Hache et al., 2014). Une simulation des observations par MAGEAQ d'un épisode de pollution à partir de la bande TIR seul et du couplage VIS+TIR a été effectuée durant cette thèse et sera présentée par la suite (chapitre 4).

Les différentes missions permettant l'observation de l'O₃ sont résumées dans le tableau 2.

	Durée de fonctionnement	Domaine spectral d'étude	Détection de l'O ₃
TOMS	1978 - 1993	UV	Mesure de l'O ₃ stratosphérique (étude de l'évolution du trou de la couche d'O ₃) puis mesure de l'O ₃ total
GOME	Depuis 1995	UV-VIS (240 – 790 nm)	Mesure de la distribution verticale de l'O ₃ dans la troposphère
SCIAMACHY	Depuis 2002	UV-VIS et proche IR (240 – 2380 nm)	Mesure de l'O ₃ dans la stratosphère et la troposphère (mesure à la fois au Limbe et au Nadir)
OMI	Depuis 2004	UV-VIS (270 – 500 nm)	Mesure de l'O ₃ troposphérique
GOME-2	Depuis 2012	UV-VIS (240 – 790 nm)	Mesure de la distribution verticale de l'O ₃ dans la troposphère
TES	Depuis 2004	IR (650 – 3050 cm ⁻¹)	Mesure de la distribution verticale de l'O ₃ dans la troposphère

IASI	Depuis 2006	IR (650 – 2760 cm ⁻¹)	Mesure de la colonne totale d'O ₃ en premier lieu puis mesure de l'O ₃ troposphérique jusqu'à 3-4 km de la surface
TES+OMI	-	Couplage IR + UV	Mesure de l'O ₃ troposphérique avec une résolution verticale et une sensibilité à l'O ₃ accrues par rapport au cas d'étude avec un unique domaine spectral
IASI+GOME-2	-	Couplage IR + UV	Mesure de l'O ₃ troposphérique jusqu'à près de 2 km de la surface
UVNS+IASI-NG	Courant 2022	Couplage IR + UV	Avec les nouvelles générations de IASI et GOME-2, le couplage IR + UV pourrait fournir des résultats encore plus performants dans l'observation de l'O ₃ troposphérique et ainsi permettre de se rapprocher encore plus de la surface
MAGEAQ	En projet	TIR + VIS	Mesure de l'O ₃ troposphérique

Tableau 2 : Tableau récapitulatif des missions satellitaires permettant d'observer l'O₃

6 Besoin de nouvelles observations de l'ozone et défis

La méthode de détection de l'ozone développée au LISA et nommée IASI+GOME2 (Cuesta et al., 2013), qui combine donc les mesures dans le TIR de IASI et les mesures dans l'UV de GOME-2, permet d'améliorer nettement la sensibilité à l'ozone et diminue la hauteur de sensibilité maximum par rapport aux méthodes utilisant une seule bande spectrale. Cependant, il est important de continuer à améliorer les méthodes de détection de l'ozone troposphérique par satellite afin de pouvoir mesurer et surveiller ses concentrations au plus bas de la troposphère, notamment dans la couche limite atmosphérique. En effet, la pollution atmosphérique étant un problème majeur actuel, il est nécessaire de pouvoir mesurer avec précision en tout point du globe la qualité de l'air. Hors, actuellement, il n'y a que les mesures in situ qui permettent d'obtenir la précisions nécessaire à cette étude, mais ces méthodes de mesure (stations de mesure, ballon sonde, ...) ne permettent pas d'obtenir une couverture spatiale suffisamment importante. L'intérêt scientifique qui motive cette thèse est donc l'amélioration de la précision de mesure des méthodes d'observation de l'ozone troposphérique à partir de mesures satellites. Pour parvenir à cela, une des possibilités est l'utilisation de cette même méthode multispectrale à deux bandes spectrales mais appliquée cette fois-ci aux observations des futures générations de satellites UVNS et IASI-NG qui ont une résolution spatiale et spectrale plus fine mais également des bruits de mesure plus faibles que GOME-2 et IASI.

Une autre possibilité, qui représente l'objectif principal de cette thèse, est d'ajouter à l'information sur l'O₃ issue des bandes UV et TIR de la méthode IASI+GOME-2 l'information tirée d'une troisième bande spectrale avec la bande VIS, et plus précisément la bande de Chappuis (500 à 650 nm) qui est également sensible à l'O₃, dans le but d'obtenir un couplage inédit des trois bandes spectrales UV+TIR+VIS. En effet,

avec l'ajout du VIS, et donc avec cet apport supplémentaire d'informations sur l'O₃, nous devrions pouvoir mesurer ce polluant plus proche de la surface et ainsi nous rapprocher du domaine de la qualité de l'air. Cependant, l'observation de l'O₃ à partir de mesures dans la bande de Chappuis implique quelques défis à résoudre. Tout d'abord, l'absorption par l'ozone du rayonnement visible est bien moins importante que pour le cas des rayonnements UV et TIR. De plus, de nombreux autres composés atmosphériques ont une sensibilité non négligeable au rayonnement visible comme la vapeur d'eau, le dioxyde d'azote NO₂, le dioxyde de soufre SO₂, mais également les aérosols et les nuages. Enfin, il faudra aussi prendre en compte l'impact d'autres variables comme la température de surface ou encore l'albédo de surface.

7 Objectifs de ma thèse

L'objectif de cette thèse est donc d'ajouter au couplage TIR+UV de la méthode IASI+GOME-2 une troisième bande spectrale avec la bande du VIS, et plus précisément la bande de Chappuis, afin d'obtenir un couplage inédit à trois bandes spectrales UV+VIS+TIR. L'utilisation de ce couplage pourrait ainsi permettre de pouvoir observer l'O₃ troposphérique au plus proche de la surface et ainsi de se rapprocher du domaine de la qualité de l'air. Mais pour cela, il est nécessaire de faire face à quelques défis, comme notamment la faible l'absorption de l'O₃ dans le VIS. Ainsi, afin de développer cette méthode de nouvelle génération pour l'observation de la pollution à l'O₃ à partir des données satellitaires, plusieurs étapes sont effectuées dans ce travail de thèse (voir la Figure 13). L'approche choisie est donc une restitution par synergie à trois bandes spectrales UV+VIS+TIR. La première étape se focalise sur la bande du visible (étape 1). Le but est d'extraire des informations sur l'ozone proche de la surface, en évitant des incertitudes associées aux autres éléments qui affectent les spectres de rayonnement visible. Par la suite, la méthode de restitution de l'ozone dans la bande VIS est associée au couplage multispectral à deux bandes, UV et TIR (Cuesta et al. 2013), afin d'obtenir un couplage à trois bandes spectrales, dénommée IASI+GOME3 (étape 2). Puis une estimation des performances de ce couplage IASI+GOME3 en utilisant des simulations d'observations de IASI et GOME-2 afin de pouvoir maîtriser chaque caractéristique et de simplifier la mise en place de la méthode est effectuée (étape 3). Une simulation des observations du capteur géostationnaire MAGEAQ se reposant sur un couplage TIR+VIS est également mise en place. Enfin, le couplage IASI+GOME3 est cette fois-ci mis en œuvre avec des observations réelles de IASI et GOME-2 (étape 4).

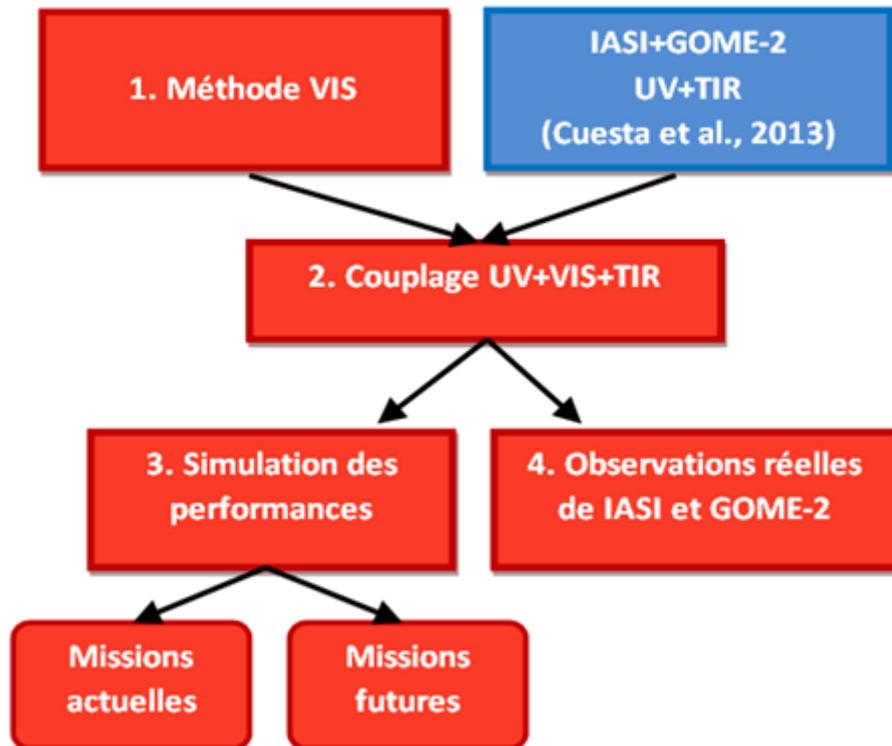


Figure 13 : Schéma récapitulatif des principales étapes de la thèse

Chapitre 2 : Méthodologie de restitution du profil vertical d'ozone

En comparaison avec les méthodes in situ de mesure, plus précises mais très limitées en couverture spatiale, les mesures satellitaires des principaux polluants atmosphériques comme l'O₃ permettent d'observer la répartition journalière de l'ozone troposphérique avec une vaste couverture spatiale, aux échelles régionale, continentale et globale. Cependant ces analyses depuis l'espace sont des mesures indirectes puisque l'on mesure ici des spectres de rayonnement interagissant avec l'atmosphère. Ainsi, afin de pouvoir remonter aux profils de concentrations de ces polluants à partir des spectres de rayonnement, on utilise une méthode dite « d'inversion ». Il est à noter que cette mesure étant indirecte, une certaine erreur de restitution sur les concentrations obtenues est associée à l'inversion. Cette erreur peut être due à l'impact des autres composés atmosphériques sur le spectre mesuré, aux contraintes mathématiques de la solution de la méthode d'inversion ou encore au bruit radiométrique de l'appareil de mesure.

La méthode IASI+GOME2, qui est le point de départ de cette thèse, est un exemple de méthode d'inversion qui utilise conjointement les spectres de radiance dans l'infrarouge thermique (TIR) mesurés par IASI et ceux de réflectance de GOME-2 dans l'ultraviolet (UV) afin de remonter aux profils de concentrations d'O₃ troposphérique. L'intérêt d'utiliser ici un couplage de plusieurs bandes spectrales est d'apporter plus d'information sur l'ozone pour obtenir après inversion des concentrations plus précises et plus proches des concentrations mesurées in situ à la surface. Le but de mon travail de thèse est donc d'améliorer encore la précision de la mesure de l'ozone en utilisant également la bande visible via un couplage à trois bandes TIR+UV+VIS.

Ainsi, dans ce chapitre nous verrons tout d'abord le principe de fonctionnement d'une méthode d'inversion et plus précisément de la méthode d'inversion par synergie multispectrale, tel que IASI+GOME2. Puis, afin de pouvoir associer la bande VIS à ce couplage TIR+UV, une estimation de l'ensemble des modifications à apporter à la méthode IASI+GOME2 sera effectuée. Enfin, la mise en place d'une méthode d'inversion nécessitant de nombreuses variables et des données d'entrée, nous identifierons les développements et besoins nécessaires à la mise en place d'une nouvelle méthode d'inversion à partir d'un couplage à trois bandes spectrales TIR+UV+VIS.

1 Méthode générale de restitution de la composition de l’atmosphère

Les capteurs IASI et GOME-2 mesurent les spectres du rayonnement au sommet de l’atmosphère dans les domaines infrarouge et ultraviolet-visible-proche infrarouge, respectivement. Ces spectres de rayonnement sont fonctions de l’état de l’atmosphère au moment où la mesure est effectuée. Ainsi, les composés atmosphériques, la nature et les caractéristiques du sol visé mais aussi les caractéristiques des capteurs ou l’angle de visée ont un impact sur ces spectres. Il est donc nécessaire de trouver une approche qui permet, à partir de ses spectres TIR et UV, de restituer les profils verticaux des composés atmosphériques étudiés avec une marge d’erreur acceptable. Il existe différentes méthodes qui, par calcul direct ou analytique à partir des spectres mesurés, permettent d’obtenir les concentrations de certains composés. Mais ce n’est pas le cas pour d’autres composés comme l’ozone, qui est donc l’objet d’étude de cette thèse, pour lequel nous allons utiliser une méthode par calcul indirecte appelée méthode d’inversion.

Par définition, en science, un problème inverse est une situation où l’on cherche à déterminer les causes d’un phénomène à partir des observations expérimentales de ses effets. Pour répondre à ce problème, il est tout d’abord nécessaire de modéliser au mieux ce phénomène afin de pouvoir associer les effets observés aux paramètres de ce modèle, appelé modèle direct. Le but d’une méthode d’inversion de données est de paramétrer au mieux ce modèle afin d’obtenir un résultat qui soit le plus proche possible de la mesure.

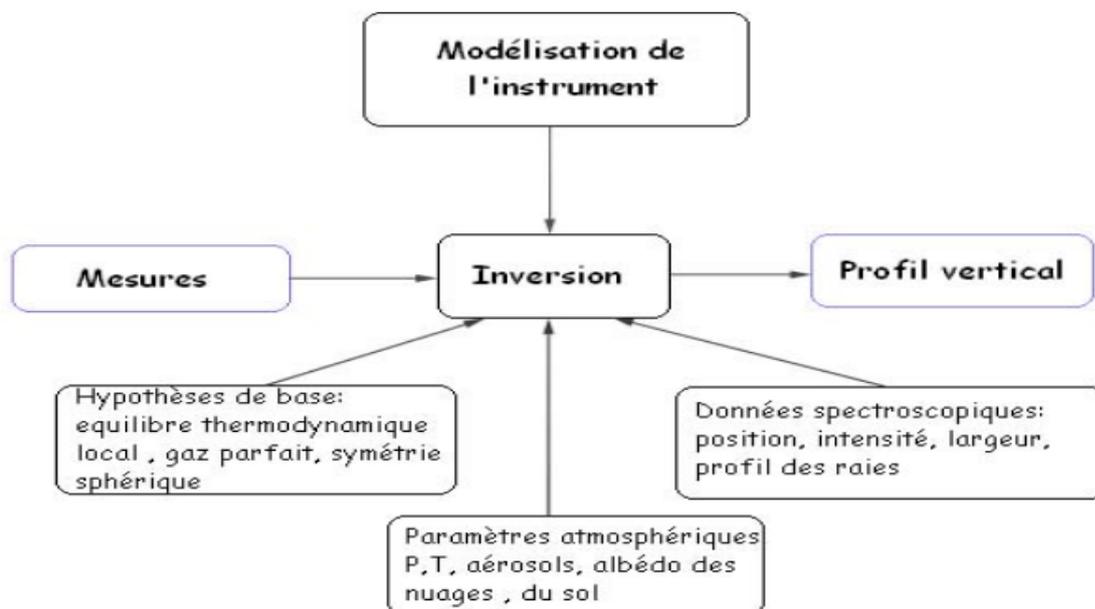


Figure 14 : Schéma du principe d’inversion (Payan S., « Algorithme d’inversion », école thématique Specatmo, Juin 2009)

Le principe de cette méthode, appliquée ici à l’inversion des profils d’ozone, est schématisé sur la figure 14. Pour pouvoir obtenir les profils verticaux des composés atmosphériques d’étude, ici de l’ozone, il est nécessaire de fournir au modèle diverses

données d'entrée. Tout d'abord, comme spécifié par l'encadré « Mesures », il faut les spectres mesurés par les capteurs spatiaux dans la bande spectrale étudiée, mais également une « modélisation de l'instrument » de mesure, c'est-à-dire une description de l'ensemble de ses caractéristiques comme sa résolution spatiale et spectrale, son étendue de mesure ou encore son bruit radiométrique. Puis, il est nécessaire de fournir les « données spectroscopiques » des composés atmosphériques pris en compte dans le cadre d'étude, comme par exemple les différents coefficients d'absorption de ses composés. Ensuite, le module d'inversion doit pouvoir simuler une représentation de l'état de l'atmosphère, il faut donc également fournir différents paramètres atmosphériques comme les profils de pression et de température, les concentrations et caractéristiques des aérosols ou encore l'albédo des nuages et l'albédo de surface. Enfin, afin de pouvoir faire l'inversion, il est primordial d'admettre certaines hypothèses comme l'équilibre thermodynamique local ou encore en considérant les différents composés atmosphériques gazeux comme des gaz parfaits.

Lors d'une inversion de données, il se peut que le résultat fourni par le modèle direct soit proche de la mesure, mais que les paramètres du modèle, qui ont été modifiés au cours de l'inversion, soient loin des paramètres réels. Pour pallier à cela, il est nécessaire d'ajouter au modèle des contraintes ou des a priori, ce qui va permettre de limiter la modification des paramètres. Mais la difficulté est de trouver une contrainte adéquate qui permette au modèle de faire varier les paramètres pour inverser les mesures avec précision tout en limitant ses variations afin de ne pas trop s'éloigner des valeurs réelles.

La méthode d'inversion IASI+GOME2 développée au LISA et avec laquelle j'ai commencé mon étude, se base sur le principe décrit dans Rodgers (2000).

1.1 Modèle direct

Ainsi à partir d'un modèle direct f , on peut modéliser un état mesuré y avec une certaine erreur de mesure notée ϵ :

$$y = f(x, b) + \epsilon \quad (2.1)$$

Où x représente l'ensemble des paramètres du modèle qui sont par la suite inversés et b les autres paramètres.

Avant l'inversion on fournit au modèle direct une valeur a priori x_a du vecteur d'état et une valeur a priori \hat{b} des paramètres que l'on suppose proches des valeurs réelles. Ainsi en linéarisant l'équation (2.1) :

$$y = f(x_a, \hat{b}) + \frac{\partial f}{\partial x}(x - x_a) + \frac{\partial f}{\partial b}(b - \hat{b}) + \epsilon \quad (2.2)$$

Avec $\frac{\partial f}{\partial x}$ la sensibilité du modèle au vecteur d'état x , appelée également fonction de poids ou jacobien K_x et $\frac{\partial f}{\partial b}$ la sensibilité du modèle au paramètre b , ou jacobien K_b .

1.2 Modèle inverse

Pour le cas d'un modèle inverse, le but est de trouver une estimation du vecteur d'état \hat{x} qui soit le plus proche possible de la valeur x de la mesure, à partir d'un état mesuré y et d'une estimation a priori des paramètres \hat{b} :

$$\hat{x} = R(y, \hat{b}) = R(f(x; b) + \epsilon, \hat{b}) \quad (2.3)$$

En linéarisant de nouveau l'équation (2.3) autour du vecteur d'état a priori x_a et des paramètres \hat{b} , on obtient :

$$\hat{x} = R[f(x_a, \hat{b}) + K_x(x - x_a) + K_b(b - \hat{b}) + \epsilon, \hat{b}] \quad (2.4)$$

Et enfin, en linéarisant par rapport au vecteur d'état mesuré y :

$$\hat{x} = R[f(x_a, \hat{b})] + G_y[K_x(x - x_a) + K_b(b - \hat{b}) + \epsilon] \quad (2.5)$$

avec $G_y = \frac{\partial R}{\partial y}$, la matrice de Gain du modèle inverse et $K_b(b - \hat{b}) + \epsilon = \epsilon_y$ l'erreur totale de la mesure relative au modèle direct. Avec $A = G_y K_x = \frac{\partial \hat{x}}{\partial x}$ la matrice des noyaux moyens (Averaging Kernels en anglais) appelée aussi AVK, on obtient :

$$\hat{x} = R[f(x_a, \hat{b})] + A(x - x_a) + G_y \epsilon_y \quad (2.6)$$

Pour comprendre le rôle important de la matrice AVK dans une étude à partir d'une méthode d'inversion, faisons l'hypothèse que le modèle est idéalement caractérisé et donc que $R[f(x_a, \hat{b})] = x_a$. L'équation (2.6) devient :

$$\hat{x} = Ax + (I - A)x_a + G_y \epsilon_y \quad (2.7)$$

avec I la matrice identité.

Ainsi, dans un cas idéal, $G_y \epsilon_y$ tend vers 0, et la matrice AVK est égale à la matrice identité. Toute l'information provient donc de la mesure et on a $\hat{x} = x$. La matrice AVK représente donc la sensibilité de l'état estimé par rapport à l'état réel et renseigne donc sur la qualité de l'inversion.

Selon Rodgers (2000), résoudre un problème d'inversion revient à minimiser l'écart entre les mesures réelles y et celles simulées par le modèle direct $f(x)$, mais aussi l'écart entre le vecteur d'état x et son a priori x_a , le tout en prenant en compte S_e et S_a , les matrices de covariance d'erreur associées à la mesure et à l'a priori. Ainsi :

$$\|y - f(x)\|_{S_e^{-1}}^2 + \|x - x_a\|_{S_a^{-1}}^2 = (y - f(x))^T S_e^{-1} (y - f(x)) + (x - x_a)^T S_a^{-1} (x - x_a) \quad (2.8)$$

Mais, afin de limiter l'erreur amenée par la non-linéarité de $f(x)$, il est nécessaire d'utiliser une minimisation itérative :

$$x_{i+1} = x_i + (K_i^T S_e^{-1} K_i + S_a^{-1})^{-1} [K_i^T S_e^{-1} (y - f(x_i)) - S_a^{-1} (x_i - x_a)] \quad (2.9)$$

où i est le numéro de l'itération et K_i le jacobien à l'itération i .

On obtient donc pour la matrice de gain et la matrice A d'AVK :

$$G_y = (K^T S_e^{-1} K + S_a^{-1})^{-1} K^T S_e^{-1} \quad (2.10)$$

$$A = (K^T S_e^{-1} K + S_a^{-1})^{-1} K^T S_e^{-1} K \quad (2.11)$$

On peut ainsi à partir des matrices de covariance S_e et S_a et du jacobien, calculer les AVK, qui renseigne donc sur la qualité de la mesure, et la matrice de gain G_y , nécessaire à l'estimation des différentes erreurs de restitution du vecteur d'état.

Les méthodes IASI+GOME2 (Cuesta et al, 2013) et IASI+GOME3, développée durant cette thèse, sont toutes deux basées sur ce principe d'inversion et utilisent respectivement 2 et 3 bandes spectrales pour inverser les profils d'ozone.

2 Méthode de restitution de l'ozone par couplage multispectral

La figure 15 est un schéma descriptif de la méthode d'inversion conjointe des spectres IASI et GOME-2 à deux bandes spectrales UV+TIR. Il s'agit de la méthode développée par l'équipe SPECAT (Cuesta et al., 2013) que j'ai rejoint dans le cadre de cette thèse. Cette méthode combine l'information de l'ozone issue des spectres IR mesurés par IASI et des observations UV de GOME-2 pour restituer des profils d'ozone troposphérique.

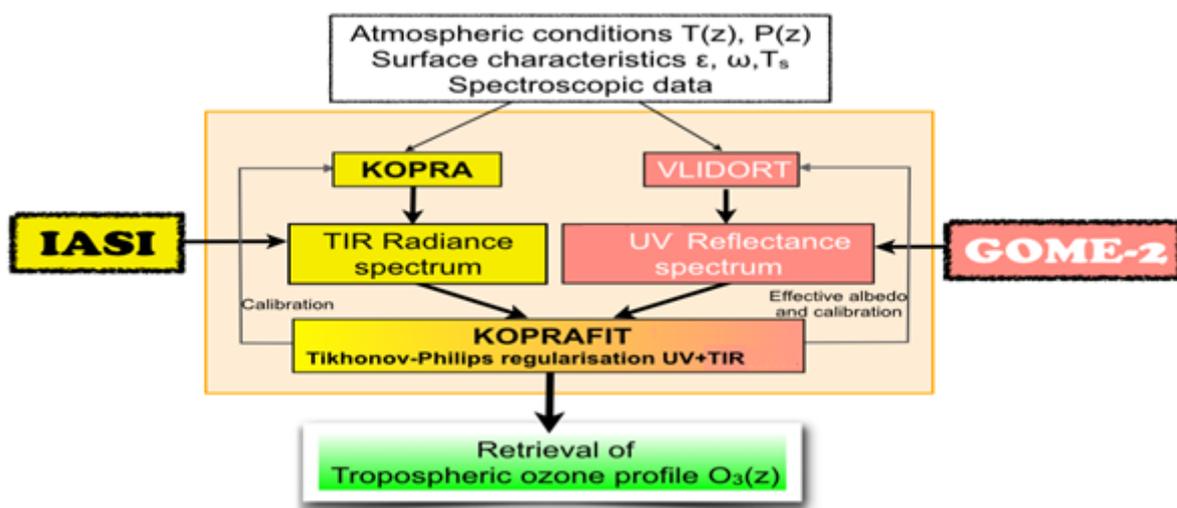


Figure 15 : Schéma récapitulatif de la méthode d'inversion à 2 bandes spectrales UV+TIR nommée IASI+GOME2 (Cuesta et al., 2013)

Le spectre IASI dans l'infrarouge thermique est simulé avec le modèle de transfert radiatif KOPRA (Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm, Stiller et al., 2000, 2002) et celui de GOME-2 dans l'ultraviolet avec le modèle VLIDORT (Vector Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer, Spurr, 2006). Pour cela, il faut fournir aux deux modèles différentes données d'entrée telles que les conditions météorologiques, des estimations climatologiques des profils verticaux des espèces gazeuses, les propriétés de la surface et des données spectroscopiques pour simuler l'absorption du rayonnement par les composés atmosphériques. Ainsi, on obtient deux spectres distincts, un dans le domaine du TIR et l'autre dans l'UV, associés aux conditions atmosphériques « a priori » choisies comme point de départ pour la restitution. Par la suite, ces deux spectres simulés sont fournis au module d'inversion KOPRAFIT. Par un processus itératif, ce module minimise la différence entre les spectres réels mesurés par les capteurs IASI et GOME-2 et ceux simulés par les modèles spectraux KOPRA et VLIDORT à travers l'ajustement des différentes variables dont les profils verticaux d'ozone.

Comme il s'agit également d'un couplage, pour la méthode d'inversion à trois bandes spectrales IASI+GOME3, on retrouve un principe similaire à celui décrit précédemment.

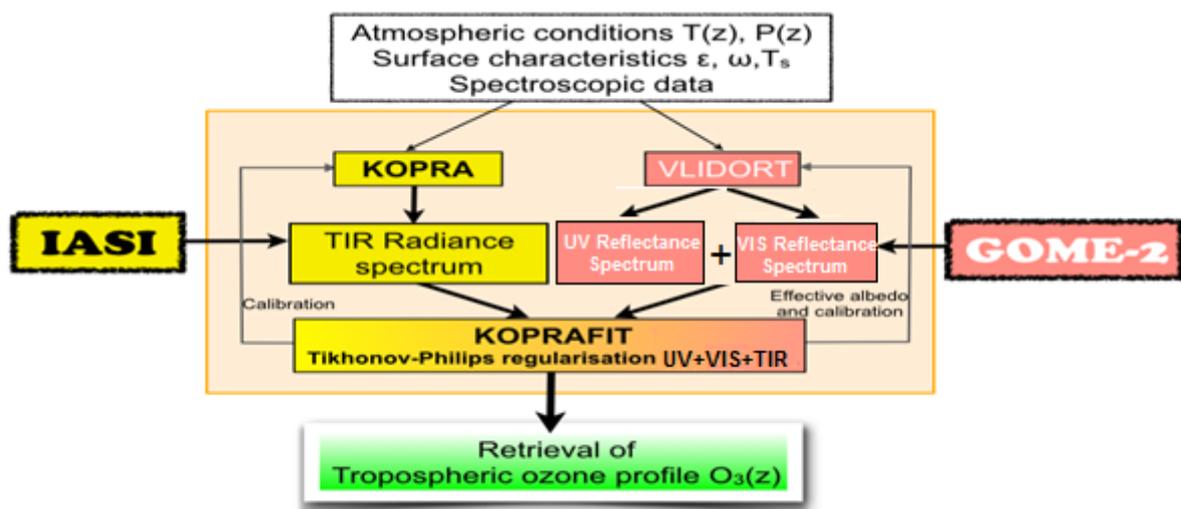


Figure 16 : Schéma récapitulatif de la méthode d'inversion à 3 bandes spectrales UV+VIS+TIR nommée IASI+GOME3 développée durant la thèse

La figure 16 présente un schéma de la méthode IASI+GOME3. Ainsi, tout d'abord les modèles de transfert radiatif KOPRA et VLIDORT vont simuler respectivement le spectre de IASI dans l'infrarouge thermique et le spectre de GOME-2 dans l'UV et le VIS. Pour cela, des données d'entrée leur sont fournies comme les conditions atmosphériques qui serviront de premières approximations ou encore différentes données spectroscopiques tels que les spectres d'absorption des différents composés atmosphériques pris en compte dans l'étude. Ces spectres sont ensuite fournis au module d'inversion KOPRAFIT qui par calcul indirect va fournir des profils verticaux de concentrations d'O₃ recherchés ainsi que les profils d'absorption des aérosols. L'objectif du module d'inversion

KOPRAFIT va être de minimiser au maximum la différence entre les spectres réels mesurés par les capteurs IASI et GOME-2 et ceux simulés par les modèles spectraux KOPRA et VLIDORT. Pour cela il va faire varier différentes variables dont les profils verticaux d'O₃ désirés et les profils d'absorption des aérosols. Ce calcul est ainsi effectué pour chaque pixel du domaine d'étude.

2.1 Mesures satellitaires

2.1.1 Mesures de IASI dans l'infrarouge

La figure 17 est un exemple de spectre de radiance de IASI qui s'étend dans cette figure de 650 à 1500 cm⁻¹ (la couverture spectrale totale est de 650 à 2760 cm⁻¹). En effet, le capteur IASI mesure le rayonnement émis par la surface, du fait de sa température, qui est ensuite en partie absorbé par l'atmosphère. Avec une température proche de 300 K, la Terre émet un rayonnement dans l'IR, rayonnement représenté sur ce graphique par la fonction de Planck à la température de surface T_s. Ainsi, les différences entre le spectre de radiance et la fonction de Planck indiquent les longueurs d'onde où le rayonnement est absorbé. Sur ce graphique sont précisés les principales composés impactant ce spectre de radiance comme l'O₃ ou encore les aérosols.

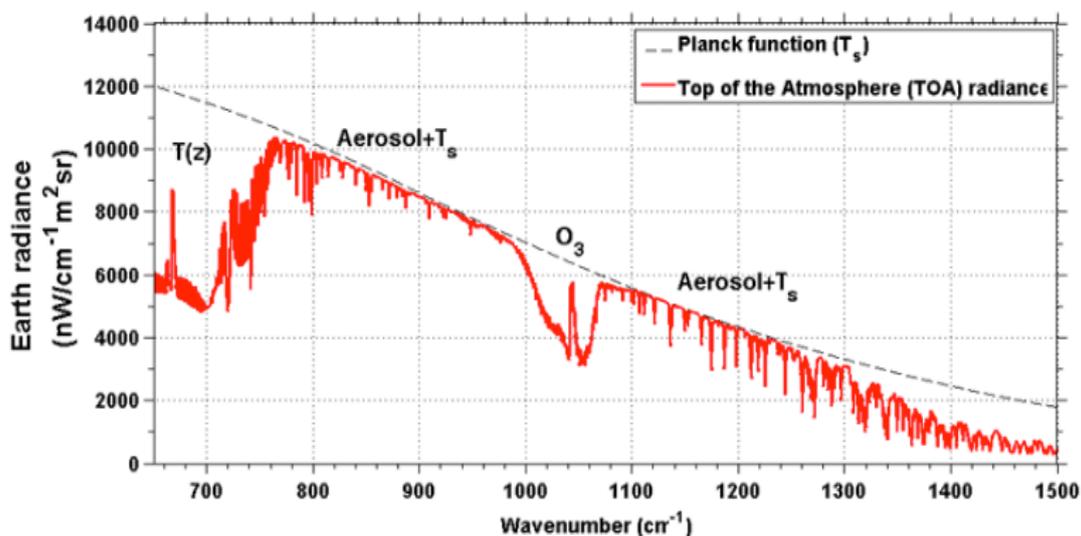


Figure 17 : Exemple de spectre de radiance dans l'IR de IASI

Pour IASI, les différentes caractéristiques spectroscopiques résumées dans le tableau 3 sont donc fournies au modèle de transfert radiatif dans l'infrarouge thermique KOPRA. Le spectre TIR est composé de 7 micro-fenêtres comprises entre 980 et 1070 cm⁻¹. IASI a une résolution spectrale de 0,5 cm⁻¹ et un intervalle d'échantillonnage de 0,25 cm⁻¹. Pour l'IR, la déviation standard du bruit est fixée à 20 nW/(cm²cm⁻¹sr) (Eremenko et al., 2008).

	IASI
Bruit radiométrique	20 nW/cm ² cm ⁻¹ sr
Résolution spectrale	0,50 cm ⁻¹
SNR (Signal to Noise Ratio)	300 à 500 pour la fenêtre atmosphérique autour de 1000 cm ⁻¹
Résolution spatiale	Pixels de 12 km de diamètre espacés de 25 km au nadir
Echantillonnage spectral	0,25 cm ⁻¹

Tableau 3 : Caractéristiques instrumentales de IASI

2.1.2 Mesures de GOME-2 de l'UV au proche IR

L'instrument GOME-2 mesure à la fois les spectres de radiance provenant du soleil et rétrodiffusé à la surface terrestre pour chaque pixel de mesure et les spectres d'irradiance solaire par une visée directe vers le soleil, effectuée de manière journalière. La grandeur utilisée dans la restitution de l'ozone est le rapport de ces deux mesures, qui est appelé « réflectance » et définit par :

$$R(\lambda) = \frac{L(\lambda)}{I(\lambda)} \quad (2.12)$$

où R est la réflectance, L(λ) la radiance rétrodiffusée par la surface terrestre, I(λ) l'irradiance provenant directement du soleil et λ la longueur d'onde.

La figure 18 est un exemple de spectre de réflectance mesuré par GOME-2 qui représente ici une mesure au dessus de la France le 19 Août 2009 par ciel clair, c'est-à-dire sans nuage. Le spectre s'étend dans la figure de 290 à 700 nm et comprend donc ici les bandes spectrales UV et VIS. Sur cette figure sont représentées certaines zones du spectre de réflectance affectées par un ou plusieurs des polluants ainsi que les trois bandes d'absorption par l'ozone qui nous intéressent (Bandes de Hartley et Huggins dans l'UV et bandes de Chappuis dans le VIS). Nous remarquons ainsi que les deux bandes de l'ozone présentes dans l'UV sont affectées par les dioxydes de soufre (SO₂) et d'azote (NO₂) et par le formaldéhyde (HCHO), tandis que la bande de Chappuis est principalement affectée par le dioxyde d'azote et la vapeur d'eau (H₂O). De plus, il est nécessaire de prendre en compte l'impact non négligeable des aérosols et de l'albédo de surface présent sur l'ensemble du spectre. Ce spectre nous montre donc l'impact non négligeable de certains composés atmosphériques dont certains ne sont pas simulés par VLIDORT dans l'approche IASI+GOME2 (comme la vapeur d'eau). L'ajout d'une 3ème bande spectrale dans le visible implique donc de prendre en compte de nouveaux éléments comme par exemple des composés atmosphériques additionnels, mais tout cela fera l'objet du prochain chapitre.

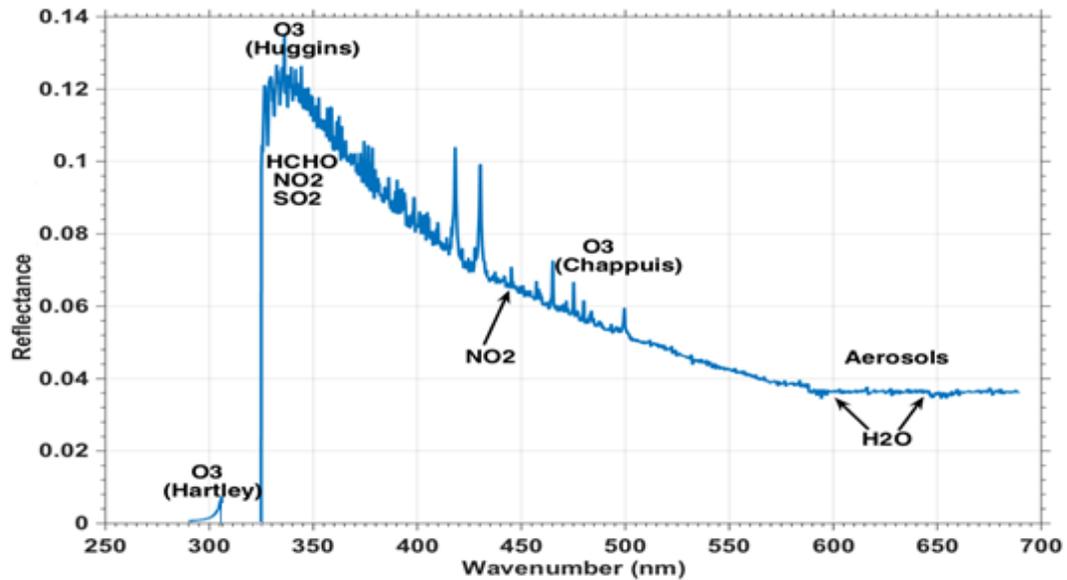


Figure 18 : Exemple de spectre de réflectance dans l'UV-VIS de GOME-2

Les différentes caractéristiques instrumentales de GOME-2, résumées dans le Tableau 4, sont fournies au modèle de transfert radiatif VLIDORT. Dans l’ultraviolet, le spectre est composé de 2 micro-fenêtres comprises entre 290 et 345 nm, ces deux micro-fenêtres incluant de ce fait les bandes d’absorption de l’ozone de Hartley et de Huggins et correspondant aux deux premiers canaux du capteur GOME-2. Les mesures de GOME-2 avant 290 nm ne sont pas utilisées à cause d’un rapport signal sur bruit trop faible. GOME-2 a une résolution spectrale moyenne de 0,24 nm et un intervalle d’échantillonnage de 0,12 nm⁻¹.

	GOME-2
Bruit radiométrique (en réflectance)	2 10 ⁻³ (λ=290 - 306 nm) 2 10 ⁻⁴ (λ=325 - 340 nm) 5 10 ⁻⁵ (λ=500 – 560 nm)
Résolution spectrale	0,22 à 0,30 nm
SNR (Signal to Noise Ratio)	32 (λ=290 - 306 nm) 350 (λ=325 - 340 nm) 700 (λ=500 – 650 nm)
Résolution spatiale	80 x 40 km ²
Echantillonnage spectral	0,12 nm

Tableau 4 : Caractéristiques instrumentales de GOME-2

En utilisant le spectre d’irradiance solaire mesuré quotidiennement par GOME-2, la réponse de l’instrument est assimilée à une fonction de fente gaussienne asymétrique dont la largeur, les décalages et les paramètres asymétriques sont ajustés pour chaque longueur d’onde (Cai et al., 2012) en la comparant avec un spectre solaire de référence (Chance and Kurucz, 2012).

De plus, un léger recalibrage est appliqué à chaque spectre UV qui est obtenu à partir de comparaisons journalières entre la réflectance mesurée et la réflectance simulée en fonction de la longueur d'onde et de la position transversale du capteur. Ce recalibrage améliore la cohérence d'étalonnage entre les canaux de GOME-2 et réduit les biais systématiques sur les profils d'ozone obtenus, biais qui dépendent de la position transversale et de la dégradation de l'appareil avec le temps.

Le bruit est calculé pour chaque longueur d'onde en utilisant les éléments de réponse de la matrice de radiance de Müller (voire Cai et al., 2012 ; 2014). Le ratio signal sur bruit est approximativement plus faible d'un facteur $1/\sqrt{8}$ que celui de Cai et al. (2012) pour les pixels grossiers 8 fois plus grands.

2.2 Simulation directes des spectres dans l'UV, VIS et IR

En plus des caractéristiques instrumentales et des conditions de mesure (comme les angles de visée), des nombreuses entrées doivent être fournis aux modèles KOPRA et VLIDORT afin de simuler de manière réaliste les spectres de IASI et GOME-2. Ces différentes entrées sont détaillées par la suite.

2.2.1 Absorption du rayonnement par les espèces gazeuses

Les paramètres spectroscopiques de l'ozone fournis à KOPRA correspondent aux coefficients d'absorption atmosphérique dans le TIR issus de HITRAN 2004 (High-resolution TRANsmission molecular absorption database ; Rothman et al., 2005) et aux sections efficaces dépendantes de la températures dans l'UV et le VIS obtenues par Brion et al. (1993). Ces paramètres spectroscopiques sont déjà utilisés et ont donc été testés pour le cas de méthodes à une bande spectrale (Eremenko et al., 2008 ; Cai et al., 2012) mais aussi à deux bandes spectrales (Cuesta et al., 2013 ; Fu et al., 2013).

Pour ce qui est des profils de concentration à priori de l'ozone, les valeurs proviennent de la climatologie de McPeters et al. (2007). Il y a un premier profil à priori pour les latitudes moyennes comprises entre 30 et 60° N, un autre pour les tropiques qui correspondent à une latitude comprise entre 20 et 30° N et un troisième pour les zones polaires entre 60 et 90°N, les conditions atmosphériques étant sensiblement différentes entre ces trois situations. La première configuration est utilisée lorsque la hauteur de la tropopause est entre 10 et 14 km au dessus du niveau de la mer, la seconde lorsque que cette hauteur est supérieure à 14 km (Sellitto et al., 2013) et la troisième pour moins de 10 km. Cette hauteur de tropopause est, quand à elle, déduite du profil de température atmosphérique qui est obtenu à l'aide du spectre de IASI. L'atmosphère simulée correspond aux 60 premiers kilomètres depuis la surface et elle est découpée verticalement avec des paliers de 1 km entre la surface et 40 km d'altitude puis des paliers de 2 km entre 40 et 60 km d'altitude.

2.2.2 Conditions météorologiques

La température de surface et le profil de température sont restitués via KOPRA/KOPRAfit en utilisant les radiances mesurées par IASI. En effet, on utilise l'émissivité de surface et les observations de la fenêtre spectrale située dans l'infrarouge

thermique entre 830 et 950 cm^{-1} pour obtenir la température de surface et la bande du CO_2 , comprise entre 700 et 750 cm^{-1} , pour le profil de température (Eremenko et al., 2008). Comme valeurs initiales des restitutions, ce sont les données météorologiques du modèle ECMWF (European Center Medium-Range Weather Forecast) qui sont utilisées.

2.2.3 Albédo de surface

Pour simuler les spectres de réflectance dans l’UV, VLIDORT utilise une base de données de l’albédo de surface issues d’une climatologie des mesures OMI pour uniquement 4 longueurs d’onde : 347, 372, 418 et 499 nm (Kleipool et al. 2008). La figure 19 présente d’une part l’évolution de cet albédo en fonction de la longueur d’onde obtenue à Paris et sur la Méditerranée (à gauche) et d’autre part une carte représentant les valeurs de l’albédo de surface extrapolées à 550 nm, soit dans de la bande de Chappuis. Ces figures nous permettent de voir que les résolutions spectrale et spatiale de cette base de données d’albédo de surface, suffisantes pour l’étude dans l’UV, semblent trop grossières pour la simulation du spectre visible.

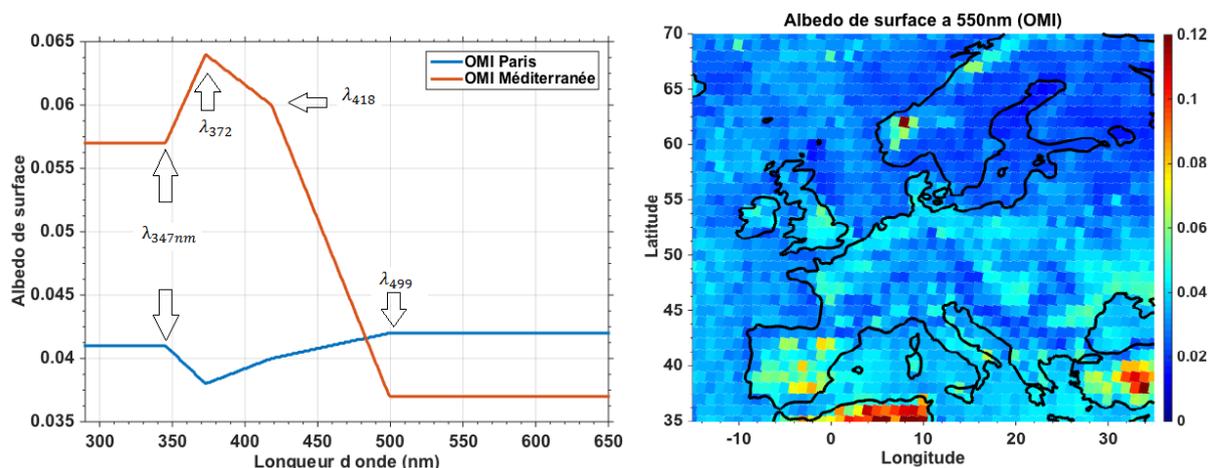


Figure 19 : Valeur de l'albédo de surface OMI en fonction de la longueur d'onde à Paris et en Méditerranée (gauche) et albédo de surface à 550nm en Europe (droite)

2.2.4 Impact radiatif des nuages et des aérosols

Il est également nécessaire de fournir aux modèles une information sur la couverture nuageuse et sur les aérosols présents lors de la mesure. Ces derniers ne sont pas modélisés dans KOPRA, mais leurs effets sur le spectre IASI sont partiellement compensés par des offsets pour chaque micro-fenêtre dans le TIR. Pour l’UV, la couverture nuageuse est équivalente à un mélange entre des simulations de réflectance pour un ciel clair sans nuage et un ciel complètement couvert de nuages, les deux configurations étant calculées. On utilise la réflectance UV mesurée par GOME-2 à 347 nm, où l’absorption de l’ O_3 ou autres gaz est faible, pour avoir une estimation de la proportion de ce mélange entre ciel sans nuage et ciel rempli de nuages. Ainsi on obtient une première approximation de la couverture nuageuse. Dans notre cas, les nuages sont modélisés comme étant des surfaces Lambertiennes avec une réflectivité de 80%, localisés à une altitude effective estimée par l’algorithme de FRESCO (Koelemeijer et al.,

2001) en utilisant de nouveau les mesures de GOME-2 mais ici à 762 nm , ce qui correspond à la bande A du dioxygène.

Vis-à-vis des aérosols, ces derniers ne sont pas modélisés directement dans VLIDORT mais leur effets sont pris en compte en ajustant à la fois l'albédo de surface et la fraction nuageuse pour chaque spectre (Liu et al., 2010 ; Cuesta et al., 2013).

2.3 Inversion multispectrale du profil d'ozone

Une description de l'inversion multispectrale de l'ozone par régulation de type Tikhonov-Philips et des variables utiles associées est présentée par la suite.

2.3.1 Vecteur de mesure y

Pour restituer le profil d'ozone, on utilise donc deux spectres différents, celui de IASI et celui de GOME-2, provenant de deux capteurs ayant des résolutions spatiales différentes. En effet, une mesure de IASI correspond à un pixel de 12 km de côté tandis qu'une mesure de GOME-2 correspond à un pixel de 80 km sur 40 km. Mais les capteurs étant tout deux embarqués à bord du même satellite MetOp, ils survolent donc les mêmes zones au même moment et mesurent avec un angle de visée similaire. Ainsi, du fait de ses deux différentes résolutions, afin d'obtenir une combinaison TIR+UV, les mesures pour un même pixel de GOME-2 sont utilisées 6 fois avec les mesures de 6 pixels de IASI différents sans que ceux-ci ne soient moyennés. C'est donc la résolution spatiale de IASI, à savoir un pixel carré de 12 km de côté, qui est utilisée pour chaque pixel IASI+GOME2.

Lors de l'inversion, pour chaque pixel, un vecteur de mesure est créé en fusionnant ensemble la radiance dans le TIR de IASI y_{TIR} et la réflectance terrestre dans l'UV de GOME-2 y_{UV} , ainsi on obtient le vecteur $y_{UV+TIR} = [y_{UV}^T \ y_{TIR}^T]^T$ (avec T pour transposé). Pour y_{TIR} sont utilisées des données de niveau 1C (provenant de <http://www.pole-ether.fr/>) et pour y_{UV} on utilise la réflectance, qui est le rapport entre la radiance rétrodiffusée et irradiance solaire calibrées en spectre de niveau 1B (<http://www.class.ncdc.noaa.gov/>). Pour chaque pixel IASI, l'inversion multispectrale est indépendante.

2.3.2 Jacobiens K

En plus de simuler les spectres de IASI et GOME-2 (comme ceux des Figures 17 et 18), les modèles KOPRA et VLIDORT calculent d'autres données d'intérêt, tels que les jacobiens. Ces derniers correspondent à la dérivée de la réflectance ou radiance mesurée par rapport à une variable associée aux conditions atmosphériques, de surface ou aux paramètres instrumentaux. Par exemple, la figure 20 est une représentation du jacobien de l' O_3 et est donc la dérivée de la réflectance par rapport à la variabilité de l' O_3 (équation 2.13). L'intérêt du jacobien est qu'il donne une information sur la sensibilité du spectre de réflectance par rapport au paramètre qui lui est associé, on a donc ici une représentation de la sensibilité du spectre de réflectance pour chaque longueur d'onde par rapport à l' O_3 . Ainsi, ce jacobien permet de souligner de nouveau la présence de trois bandes d'absorption de l' O_3 , dans l'UV avec la bande de Hartley et de Huggins et dans le VIS avec la bande de Chappuis, cette dernière étant nettement moins intense que les deux autres.

$$K_{O_3} = \partial \left(\frac{\text{Reflectance}}{O_3(z)} \right) \quad (2.13)$$

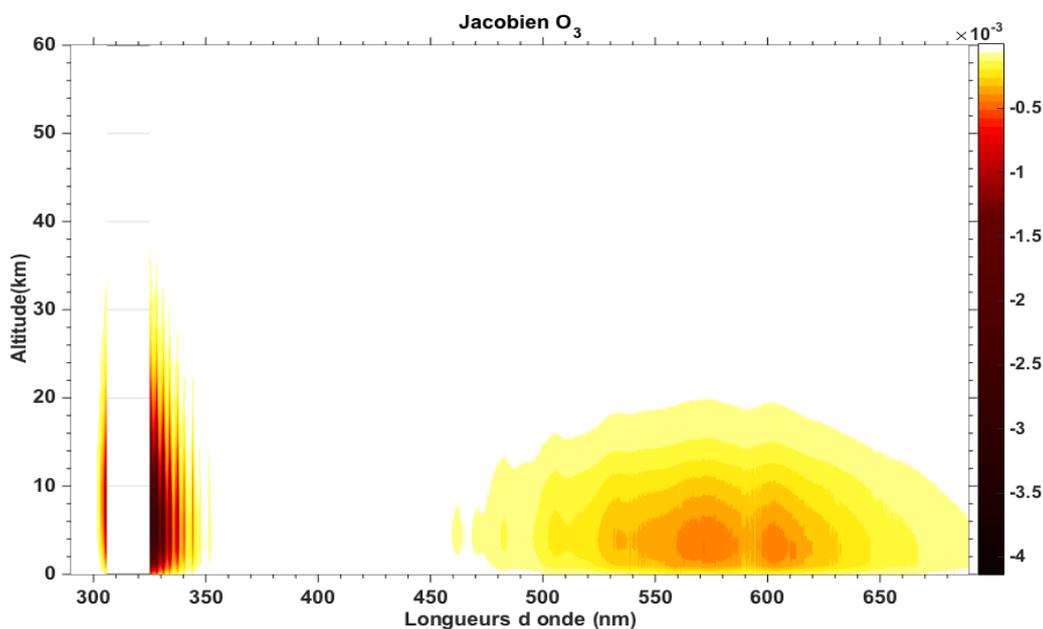


Figure 20 : Jacobien (en ppm⁻¹) des reflectances de l'UV au VIS par rapport aux concentrations d'ozone entre la surface et 60 km d'altitude

La figure 21, qui représente le jacobien de la vapeur d'eau entre 290 et 650 nm, indique les longueurs pour lesquelles l'absorption du spectre par la vapeur d'eau est importante. Or, la vapeur d'eau étant présente en grande quantité sous forme gazeuse dans l'atmosphère, cela pourrait représenter une erreur de restitution importante et donc handicapante si l'on souhaite pouvoir restituer des profils d'ozone. Cependant, comme son jacobien en spectre de raies le montre, la vapeur d'eau absorbe à des longueurs d'onde spécifiques. Ainsi, une sélection adéquate de longueurs d'onde, écartant celles où la vapeur d'eau absorbe le rayonnement, pourrait être une bonne alternative à ce problème.

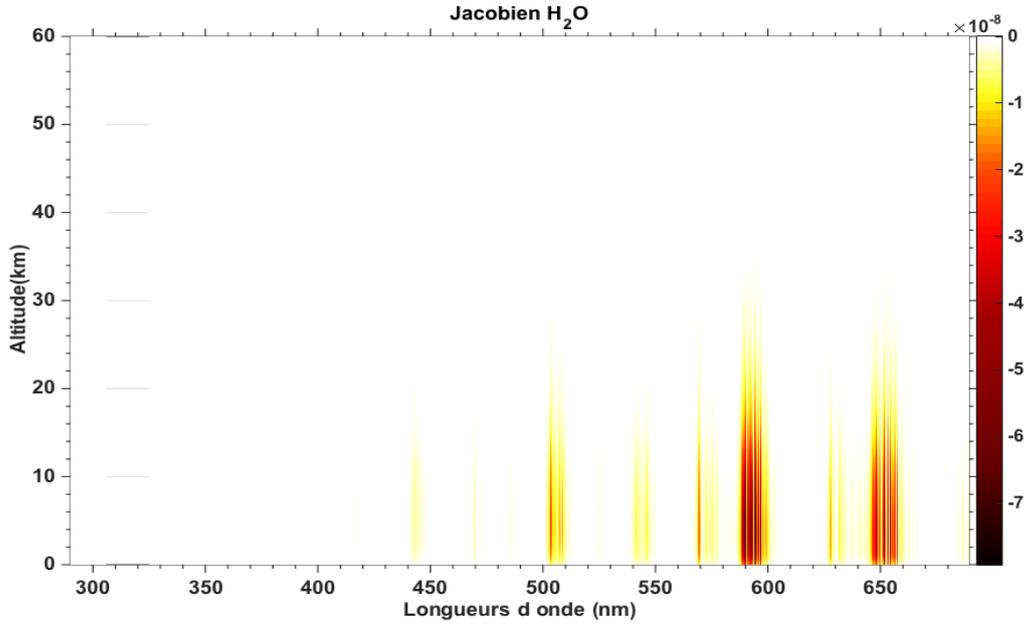


Figure 21 : : Jacobien (en ppm⁻¹) des reflectances de l'UV au VIS par rapport aux concentrations de vapeur d'eau entre la surface et 60 km d'altitude

Pour le cas multispectral, la matrice jacobien K_{UV+TIR} est mise en place en associant les jacobiens calculés par KOPRA et VLIDORT, ainsi

$$K_{UV+TIR} = [K_{UV}^T \quad K_{TIR}^T]^T \quad (2.14)$$

2.3.3 Vecteur d'état x

Lors du processus itératif pour restituer le profil d'ozone, un vecteur d'état regroupe l'ensemble des variables qui sont ajustées afin de minimiser l'écart entre les spectres mesurés et observés. Pour le cas de la restitution multispectrale à 2 bandes IASI+GOME2, le vecteur d'état x_{UV+TIR} est :

$$x_{UV+TIR} = [x_{O_3}^T \quad x_{H_2O}^T \quad x_{offsetTIR}^T \quad x_{shiftUV}^T \quad x_{ringUV}^T \quad x_{albedoUV}^T \quad x_{cloud}^T]^T \quad (2.15)$$

Le processus d'inversion de y_{UV+TIR} permet donc d'obtenir un profil d'ozone x_{O_3} (en rapport de mélange), en ajustant conjointement le profil de vapeur d'eau x_{H_2O} , les offsets $x_{offsetTIR}$ pour chaque micro-fenêtre dans l'IR, des décalages en longueurs d'onde $x_{shiftUV}$ pour les spectres UV de radiance et d'irradiance, des facteurs multiplicatifs x_{ringUV} des spectres de l'effet Ring ou Raman, des coefficients d'un polynôme en fonction de la longueur d'onde multiplicatif de l'albédo de surface $x_{albedoUV}$ (un facteur constant pour le canal 1 de GOME-2 et 3 paramètres d'une fonction de longueur d'onde polynomiale de second degré pour le canal 2) et un paramètre pour la couverture nuageuse x_{cloud} . Les valeurs a priori des profils d'O₃ fixées proviennent de la climatologie de McPeters et al. (2007), comme annoncé plus tôt. Pour chaque pixel, l'analyse ECMWF est interpolée pour obtenir les profils a priori de x_{H_2O} . Enfin, $x_{offsetTIR}$

et $x_{shiftUV}$ ont une valeur initiale fixée à 0 et tous les facteurs multiplicatifs sont fixés à une valeur de 1.

Pour le cas du couplage à trois bandes TIR+UV+VIS, le vecteur d'état par extension directe est

$$x_{UV+VIS+TIR} = [x_{O_3}^T \ x_{H_2O}^T \ x_{offsetTIR}^T \ x_{shiftUV}^T \ x_{ringUV}^T \ x_{albedoUV}^T \ x_{shiftVIS}^T \ x_{ringVIS}^T \ x_{albedoVIS}^T \ x_{cloud}^T]^T \quad (2.16)$$

Cependant, des études détaillées dans le chapitre 4 montrent le besoin d'inclure des additionnels d'ajustement conjoint (notamment les aérosols) dans le processus de restitution de l'ozone. La recherche des variables d'ajustement conjoint est en effet un point important qui sera traité durant cette thèse.

2.3.4 Contraintes d'inversion

Pour inverser y_{UV+TIR} , une méthode d'ajustement des moindres carrés contrainte par une régularisation dépendante de l'altitude de type Tikhonov-Phillips (Tikhonov, 1963 ; Kulawik et al., 2006) a été implémentée dans KOPRAFIT et permet d'optimiser la sensibilité à l'ozone dans la basse troposphère. La matrice de régularisation $R_{UV+TIR}^{O_3}$ va contraindre les différences finies d'ordre zéro, un et deux du profil d'ozone, le tout en adéquation avec les informations fournies par y_{UV+TIR} . Cette matrice n'est pas déterminée par des connaissances a priori sur la climatologie et donc sur la distribution verticale de l'ozone, mais elle repose sur la minimisation des erreurs suite à l'inversion et la maximisation des degrés de liberté. Les degrés de liberté (ou DOF pour Degrees Of Freedom) sont considérés comme une variable donnant une information sur la sensibilité de la totalité ou d'une partie du profil ou encore sur l'indépendance sur la verticale des différents points de mesure du profil d' O_3 restitué. Pour cette méthode d'ajustement, les forces des contraintes dépendantes de l'altitude sont une fonction polynomiale de l'altitude, dont les coefficients sont dérivés en minimisant la fonction F suivante :

$$F = k_1 \frac{S_{LMT}^{tot}}{(DOF_{LMT})^N} + k_2 \frac{S_{LT}^{tot}}{(DOF_{LT})^N} + k_3 \frac{S_{TOTAL}^{tot}}{(DOF_{TOTAL})^N} \quad (2.17)$$

Ainsi quand F est minimisé, les degrés de liberté (DOF) sont maximisés tandis que l'erreur totale est minimisée simultanément pour plusieurs colonnes atmosphériques.

On différencie ici trois couches d'atmosphères différentes, la très basse troposphère sous les 3 km d'altitude (LMT pour « LowerMost Troposphere »), la basse troposphère située sous les 6 km d'altitude (LT pour « Lower Troposphere ») et la colonne totale d'atmosphère allant de la surface à 60 km d'altitude (TOTAL). Ainsi, on différencie les DOF et l'erreur totale S^{tot} après inversion de chacune de ses 3 couches. Les valeurs des coefficients k_1 , k_2 , k_3 et N sont choisies pour que l'erreur totale sur l'ensemble de la colonne S_{col}^{tot} dans ce cas corresponde approximativement avec celle dans le cas de la méthode IASI seul (Dufour et al., 2012). De cette manière, l'information amenée par les mesures GOME-2 va améliorer la résolution verticale ou les DOFs, sans réduire l'erreur totale, par rapport à IASI seul.

2.3.5 Estimation des erreurs

Lors de l'inversion, différentes sources d'erreur sont à prendre en compte et il est possible de les estimer en se basant sur les travaux et formulations développés par Rodgers (2000) et Worden et al. (2006). Ainsi la matrice d'erreur totale S^{tot} est estimée à l'aide de l'approche de Rodgers (2000) mais en remplaçant toutefois dans cette approche la matrice de covariance par la matrice de régularisation de type Tikhonov-Phillips $R_{UV+TIR}^{O_3}$ (Steck and von Clarmann, 2000 ; Steck, 2002). Cette matrice d'erreur totale est donc la somme de toutes les erreurs :

$$S^{tot} = S^{smooth} + S^{mes} + S_{H_2O}^{cross} + S_{param}^{cross} + S_{CO_2}^{syst} + S_T^{syst} \quad (2.18)$$

Elles regroupent ainsi l'erreur de lissage S^{smooth} , l'erreur de mesure associée au bruit radiométrique des capteurs S^{mes} , les erreurs amenées par l'ajustement de la vapeur d'eau $S_{H_2O}^{cross}$ et celles d'autres variables d'ajustement S_{param}^{cross} (ces deux dernières étant calculées selon Worden et al., 2007a) et les erreurs systématiques associées au dioxyde de carbone $S_{CO_2}^{syst}$ et au profil de température S_T^{syst} . L'erreur de lissage S^{smooth} provient du fait que chaque point de mesure est en partie dépendant des points de mesure proches, cette démarche permettant de contenir l'inversion et ainsi d'éviter d'obtenir des valeurs aberrantes.

$$S^{smooth} = (A - I)S_e(A - I)^T \quad (2.19)$$

$$S^{mes} = G_y S_e G_y^T \quad (2.20)$$

L'erreur de lissage et l'erreur associée au bruit radiométrique S^{mes} représentent les erreurs les plus importantes après l'inversion, comme c'était le cas pour les études IASI seul et GOME-2 seul. De plus, l'erreur totale S^{tot} est de même proportion pour le cas IASI+GOME2 que pour les cas d'étude IASI seul et GOME-2 seul, chacun ayant été effectué avec des matrices de régularisation spécifique $R_{TIR}^{O_3}$ et $R_{UV}^{O_3}$.

2.3.6 Performance de la restitution de l'ozone

Pour juger de la qualité de l'inversion, on peut bien entendu analyser la matrice d'erreur totale S^{tot} ainsi que les différentes erreurs qui la composent mais ils existent également d'autres variables pour cela. En effet, on peut également analyser les degrés de liberté (ou DOF), les noyaux moyens (ou AVK pour « Averaging Kernels ») ou encore la hauteur de sensibilité maximum H_{max} , ces trois variables étant liées.

Les DOFs, comme précisé plus tôt, donnent une information sur le nombre d'éléments indépendants sur la verticale pour l'ensemble ou une partie du profil d' O_3 restitué, selon si l'on choisit d'étudier tout le profil ou une colonne spécifique. Les DOFs sont obtenus en calculant la trace de la matrice AVK, c'est-à-dire en sommant les coefficients diagonaux de l'AVK (Rodgers et al, 2000). L'AVK, ou noyaux moyens, est donc une matrice qui donne une information sur la sensibilité de l'inversion mais pour chaque point de mesure et donc pour chaque altitude, et permet également de donner un aperçu du lissage de l'inversion, chaque point de mesure ayant un impact sur les points de

mesure proches de lui lors de l'inversion. Les AVKs sont obtenus en appliquant l'équation suivante qui utilise une matrice de régularisation de type Tikhonov-Phillips (Steck and von Clarmann, 2000 ; Steck, 2002 ; and Eremenko et al., 2008) :

$$A = [K_{UV+TIR}^T (S_{UV+TIR}^\varepsilon)^{-1} K_{UV+TIR} + R_{UV+TIR}]^{-1} K_{UV+TIR}^T (S_{UV+TIR}^\varepsilon)^{-1} K_{UV+TIR} \quad (2.21)$$

avec K_{UV+TIR} la matrice jacobienne après couplage multispectral et R_{UV+TIR} la matrice de régularisation.

Enfin, la hauteur de sensibilité maximum ou H_{max} est définie pour une colonne partielle donnée et elle correspond à l'altitude où la sensibilité à l'ozone et donc où la valeur de l'AVK pour la colonne choisie est la plus importante. Or plus la valeur de l'AVK est importante, plus la sensibilité à l'O₃ de l'inversion est importante. Ainsi, comme on souhaite observer le panache d'O₃ troposphérique donc l'O₃ proche de la surface, il est important de savoir à quelle altitude se trouve ce maximum de sensibilité et donc de voir à quel point on se rapproche de la surface.

AVK, DOF et H_{max} sont donc liés, les deux derniers étant obtenus à partir de calculs sur les AVKs. Ainsi, si les AVKs permettent de donner une vision d'ensemble de la qualité de l'inversion et un aperçu du lissage, pour chaque point d'étude à chaque altitude, l'utilisation des DOFs et de H_{max} permet de résumer les informations les plus importantes à tirer de ses AVKs, à savoir la sensibilité globale de l'inversion sur l'ensemble ou une partie de la colonne d'étude et l'altitude à laquelle cette sensibilité est maximum, ce qui permet ainsi de comparer plus aisément chaque cas d'étude.

Ainsi, pour une colonne partielle donnée, telle que la très basse troposphère (LMT), on a :

$$DOF_{LMT} = Tr(A_{LMT}) \quad (2.22)$$

et

$$H_{LMT}^{max} = z^{max[A_{LMT}]} \quad (2.23)$$

2.3.7 Performances de la méthode multispectrale à 2 bandes

La figure 22 est une représentation des AVKs de la colonne atmosphérique 0-12 km pour les configurations à une bande spectrale avec l'IR seul et l'UV seul et pour le couplage à deux bandes spectrales TIR+UV, le tout pour des cas de pixel situé au-dessus de la terre et au-dessus de la mer. Chaque courbe représente l'AVK d'un des 13 points de mesure qui composent cette colonne 0-12km, les couleurs les plus claires correspondant aux AVKs des altitudes les plus élevées.

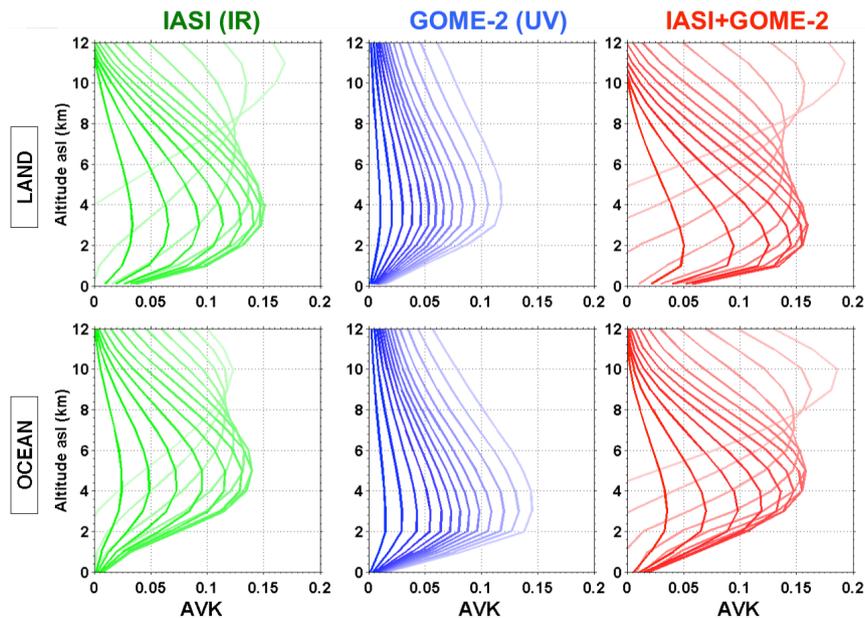


Figure 22 : Noyaux moyen ou Averaging Kernels (AVK) pour les bandes spectrales TIR seul, UV seul et UV+TIR pour des pixels situés au-dessus de la terre et au dessus de la mer (Cuesta et al., 2013)

Sur ces figures, on remarque que pour le couplage IASI+GOME2 les valeurs des AVKs sont plus élevées, notamment pour les couches les plus basses, que pour les deux cas à une bande spectrale, ce qui met en avant une augmentation de la sensibilité plus importante avec ce couplage. Si l'on regarde les cas de pixel au-dessus de la terre, on remarque que le pic d'AVK le plus proche de la surface se situe à environ 2 km d'altitude, soit une diminution de 1 km par rapport à IASI et de 2 km par rapport à GOME-2. De plus, on remarque la présence de deux pics distincts pour le couplage sur terre comme sur mer que l'on ne retrouve que pour le cas IASI seul sur terre, mais avec valeurs d'AVKs plus importantes pour IASI+GOME2. On peut donc suggérer qu'avec le couplage TIR+UV, on peut distinguer et différencier l'O₃ situé entre la surface et 6 km d'altitude et celui qui se trouve au dessus de 6 km d'altitude.

Pour le pixel au dessus de la mer, on remarque que pour le cas IASI seul est pour le couplage les AVKs piquent plus loin de la surface que pour le pixel au-dessus de la terre. Cette différence s'explique par le contraste thermique important entre la surface et la couche atmosphérique la plus basse, impactant ainsi la mesure dans l'IR. Malgré cela, le couplage IASI+GOME2 a également, dans le cas de pixel au dessus de la mer, des valeurs d'AVKs et donc une sensibilité supérieures par rapport aux configurations à une bande spectrale.

Comparons maintenant les différentes combinaisons de bandes spectrales en observant les valeurs de DOFs et de H_{\max} obtenues pendant un épisode de pollution à l'ozone.

		IASI		GOME-2		IASI+GOME2	
		Terre	Mer	Terre	Mer	Terre	Mer
DOF	Surf. - 60 km	3,43	3,20	3,41	3,32	5,20	4,92
	Surf. - 6 km	0,62	0,52	0,25	0,24	0,75	0,64
	Surf. - 3 km	0,24	0,16	0,08	0,08	0,34	0,23
H_{\max} (km)	Surf. - 6 km	3,21	4,36	3,72	3,66	2,50	3,81
	Surf. - 3 km	3,02	4,26	3,68	3,64	2,20	3,42

Tableau 5 : comparaison des valeurs de DOFs et H_{\max} après inversion pour les cas à une bande spectrale IR seul et UV seul et pour le couplage IASI+GOME2 pour différentes colonnes atmosphériques pendant l'épisode de pollution à l'O₃ du 19 et 20 Août 2009 (Cuesta et al., 2013)

Le tableau 5 regroupe donc les valeurs de DOFs et de H_{\max} pour le cas TIR seul, UV seul et pour le couplage TIR+UV sur terre et sur mer pour différentes colonnes atmosphériques. Ces valeurs sont les moyennes de l'ensemble des pixels au-dessus de l'Europe pour les journées du 19 et 20 Août 2009, période qui correspond à un épisode important de pollution à l'O₃.

On remarque que les DOF au dessus de la terre sur la colonne totale sont presque le double pour le couplage que pour IASI seul et GOME-2 seul. Sur les colonnes 0-6 et 0-3 km, le couplage IASI+GOME2 offre des DOFs supérieures d'un facteur 3 par rapport à l'UV seul, sur terre comme sur mer, et elles sont près de 40% plus élevées que celle du TIR seul, sur terre et sur mer.

La hauteur de sensibilité maximale indique des performances clairement améliorées avec le couplage IASI+GOME2. En effet, que ce soit pour la colonne 0-6 km ou pour la colonne 0-3km, H_{\max} est inférieur de plus d'1 km pour IASI+GOME2 par rapport à GOME-2 et d'un peu moins d'1 km par rapport à IASI sur terre. Si cette différence reste à peut près similaire sur mer par rapport à IASI, on remarque que pour la colonne 0-6 km, la valeur de H_{\max} de GOME-2 est légèrement inférieure à celle du couplage, mais on a vu précédemment que la valeur des DOFs, et donc la sensibilité, était plus importante dans le cas du couplage. Ainsi, ces variables étant liées, la comparaison des AVKs et celle des DOFs et de H_{\max} pour les trois configurations de bandes spectrales IASI, GOME-2 et IASI+GOME2 ont montré des résultats similaires. Le couplage de la bande spectrale TIR avec l'UV améliore significativement la sensibilité de l'inversion et permet ainsi de distinguer deux pics d'O₃, un premier proche de la surface et un second au-dessus de 6 km d'altitude. Le couplage permet également de diminuer la hauteur de sensibilité maximum et ainsi de distinguer l'O₃ plus proche de la surface, avec un pic autour de 2 km d'altitude.

Ces résultats confirment que l'association de deux bandes spectrales sensibles a permis d'améliorer significativement les performances de détection de l'O₃ troposphérique. En me basant sur la méthode IASI+GOME2, mon travail de thèse consiste à associer à l'approche à deux bandes TIR+UV une troisième bande spectrale avec la bande du VIS.

3 Conclusions

Nous avons décrit en détail la méthodologie pour restituer le profil vertical d'ozone dans l'atmosphère à partir des spectres de rayonnements mesurés par satellite, notamment pour la synergie des mesures de plusieurs domaines spectraux. C'est une approche puissante qui nécessite la simulation du transfert radiatif atmosphérique pour estimer le plus précisément possible les spectres de rayonnement mesurés par les satellites ainsi que sa sensibilité par rapport aux multiples variables, c'est à dire les jacobiens. Le couplage des multiples bandes spectrales implique dans un premier temps la simulation précise des mesures dans chaque domaine spectral.

Pour estimer les profils verticaux d'ozone, une méthode d'inversion compare les spectres mesurés et simulés pour des longueurs d'onde spécifiques et ajuste itérativement de multiples variables jusqu'à obtenir le meilleur accord entre les spectres, pour des solutions acceptées du point de vue physique. L'utilisation d'une nouvelle bande spectrale dans la restitution, telle que la bande visible, implique ainsi le choix des longueurs d'onde de comparaison spectrale et les variables (atmosphériques, de surface ou instrumentales) qui sont ajustées.

L'amélioration de la restitution à l'ozone par couplage UV+TIR par rapport aux mesures utilisant une seule bande spectrale est clairement démontrée. Le fort potentiel d'un couplage UV+VIS+TIR, incluant la bande VIS, pour mieux observer la pollution à l'ozone est la motivation de ce travail de thèse. Le chapitre 3 décrit les développements pour i) simuler les spectres et jacobiens dans la bande VIS et ii) pour extraire l'information sur l'ozone en l'inversant.

Chapitre 3 :

Développement de la méthode de restitution de l’ozone dans la bande visible de Chappuis mesurée par GOME-2

L’utilisation additionnelle de spectres de rayonnement mesurés dans la bande visible de Chappuis permet d’envisager une amélioration des performances dans l’observation de l’ozone troposphérique à partir de mesures satellitaires. Il est cependant nécessaire de prendre en compte que non seulement l’absorption du rayonnement par l’O₃ dans le visible est nettement plus faible que dans le cas de l’UV ou du TIR mais également des incertitudes associées aux signatures spectrales non négligeables d’autres composés atmosphériques, comme les aérosols, les nuages ou encore la vapeur d’eau.

Cette partie de la thèse se focalise sur le développement de la méthode de restitution de l’ozone à partir des mesures dans la bande visible de Chappuis de GOME-2. Mon travail se portera d’abord sur l’analyse spectroscopique de la bande VIS de Chappuis (de 500 à 650 nm) afin de déterminer l’ensemble des espèces atmosphériques et des conditions d’observation pouvant avoir un impact significatif sur la mesure de réflectance GOME-2. Ensuite, des améliorations sur la climatologie de l’albédo de surface utilisée pour simuler les spectres de GOME-2 sont présentées. Finalement, une sélection de longueurs d’onde est effectuée afin de limiter au maximum les erreurs sur l’ozone associées aux espèces et variables introduisant des incertitudes dans la méthode d’inversion.

1 Etapes du développement de la méthode VIS de restitution de l’ozone

La figure 23 présente un schéma résumant les principales étapes mises en place lors du développement de la méthode pour la bande VIS. La première étape du développement est de compléter pour la bande visible les bases de données spectroscopiques (gaz, aérosols et albédo de surface) pour simuler les spectres VIS avec le modèle de transfert radiatif VLIDORT. Ensuite, je choisis des longueurs d’onde spécifiques dans la bande d’absorption du Chappuis (500 à 650 nm) qui apportent de l’information sur l’ozone et dont l’impact de l’absorption d’autres gaz est négligeable. Finalement, j’effectue une analyse des variables qui ont besoin d’être ajustées conjointement avec le profil d’ozone afin de réduire la différence entre la mesure et la simulation.

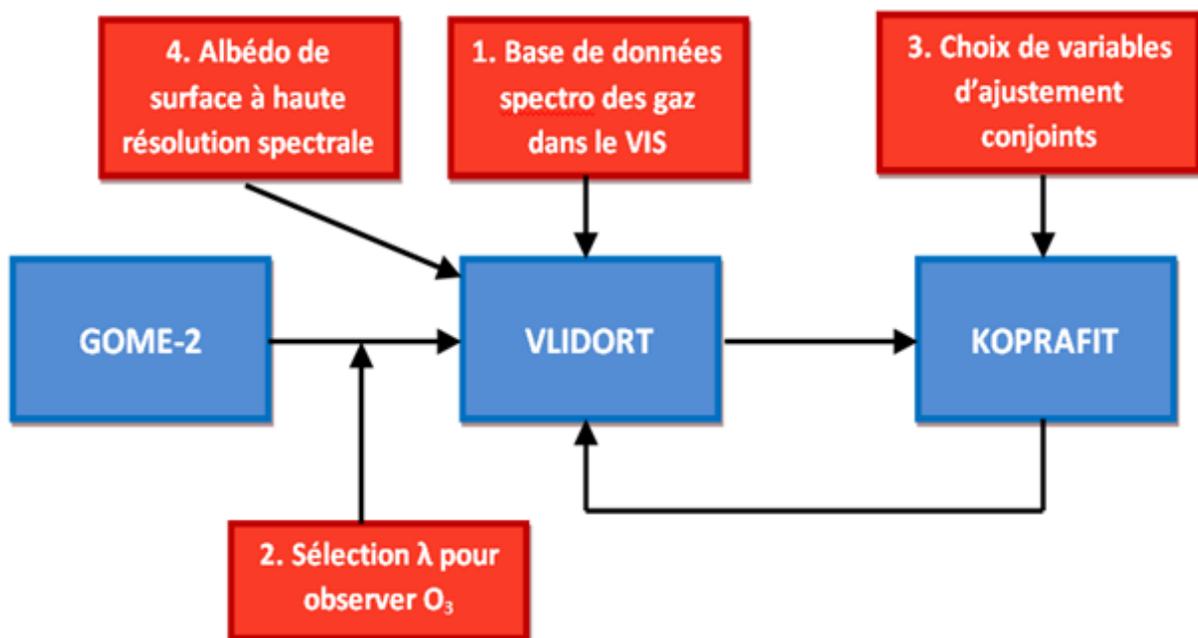


Figure 23 : Schéma descriptif des étapes de développement de la méthode d’observation de l’ozone dans la bande visible de Chappuis

2 Simulation du spectre de réflectance dans le VIS avec VLIDORT

La première partie de mon travail a ainsi consisté à inclure la bande du VIS au sein de ce code et donc à l’ajouter aux bandes spectrales du TIR et de l’UV prise en compte dans la méthode d’inversion. Sur le spectre, la simulation de la réflectance dans la bande VIS nécessite la prise en compte explicite de la diffusion du rayonnement, simple et multiple, comme pour le cas de la bande UV. C’est donc le code de transfert radiatif VLIDORT que j’utilise pour la simulation des réflectances autant dans l’UV que dans le VIS. Ainsi, j’ai tout d’abord étendu la bande spectrale jusqu’à 700 nm pour obtenir au final 3 micro-fenêtres, l’une allant de 290 à 305 nm, qui inclut la bande de Hartley, l’autre entre 325 et 340 nm pour la bande de Huggins et finalement les spectres entre 500 à 700 nm, incluant la bande de Chappuis dans le VIS (entre 500 et 650 nm environ). Pour cela et

comme expliqué dans les sections suivantes, trois éléments clé ont été complétés dans le code VLIDORT : les sections efficaces d’absorption des gaz, la prise en compte des aérosols et l’albédo de surface à haute résolution spectrale.

2.1 Sections efficaces des gaz absorbant dans la bande VIS

Étendre la bande spectrale signifie premièrement compléter les différentes bases de données nécessaires pour simuler le spectre GOME-2, le code VLIDORT utilisé pour IASI+GOME2 ne comprenant jusqu’à présent que la partie UV. Ainsi, j’ai complété les bases de données des sections efficaces d’absorption des composés atmosphériques pris en compte jusqu’à présent dans VLIDORT, à savoir la vapeur d’eau (H_2O), le dioxyde de soufre (SO_2) et le dioxyde d’azote (NO_2), le tout à l’aide des bases de données HITRAN et GEISA. La section efficace d’absorption est une grandeur reliée à la probabilité d’absorption par une molécule ou particule d’un rayonnement à une longueur d’onde donnée, elle est exprimée en cm^2 .

Par la suite, j’ai cherché à identifier les différentes espèces et variables susceptibles d’avoir un impact dans la restitution de l’ozone dans le domaine de l’UV et du visible. J’ai donc effectué diverses recherches dans la littérature afin de déterminer quels polluants absorbent dans ses longueurs d’ondes, d’obtenir leurs sections efficaces d’absorption ou encore leurs profils typiques de concentration. Ainsi, suite à ces recherches, j’ai ajouté aux polluants déjà pris en compte dans VLIDORT (H_2O , SO_2 et NO_2) le formaldéhyde de formule $HCHO$, gaz présent dans l’atmosphère en concentration non négligeable et absorbant entre autre dans la bande de l’UV et du VIS. J’ai également complété la base de données de VLIDORT afin d’étendre jusqu’aux longueurs d’onde du VIS les coefficients d’absorption des aérosols, dont l’impact important se retrouve sur l’ensemble du domaine spectral d’étude, ainsi que les bases de données d’albédo des nuages et d’albédo de surface dans le VIS.

La figure 24 montre une représentation des jacobiens, ou matrice de dérivées, des quatre gaz choisis en plus de l’ozone en fonction de la longueur d’ondes (en nm) et de l’altitude (différentes courbes sur le même graphe). Comme expliqué précédemment, les jacobiens permettent de décrire l’impact relatif de chaque composant atmosphérique, de surface ou paramètre instrumental. A noter que le spectre n’est pas complet, en effet la bande, comprise entre 305 et 325 nm, n’est pas étudiée car les mesures de GOME-2 ne peuvent pas être exploitées due à un problème d’étalonnage entre les canaux 1 et 2. On peut donc remarquer que le jacobien de l’ozone met bien en évidence la présence de bandes d’absorption dans l’UV (bandes de Hartley et Huggins) et dans le visible (bande de Chappuis), l’absorption dans le visible étant moins intense. La vapeur d’eau semble, quant à elle, absorber uniquement dans le visible de manière discontinue, tandis que le dioxyde de soufre et le formaldéhyde absorbent eux dans l’UV. Le dioxyde d’azote, quant à lui, a un spectre d’absorption continu qui s’étend de 300 nm jusqu’à presque 600 nm et a donc un impact à la fois dans l’UV et dans une partie du visible.

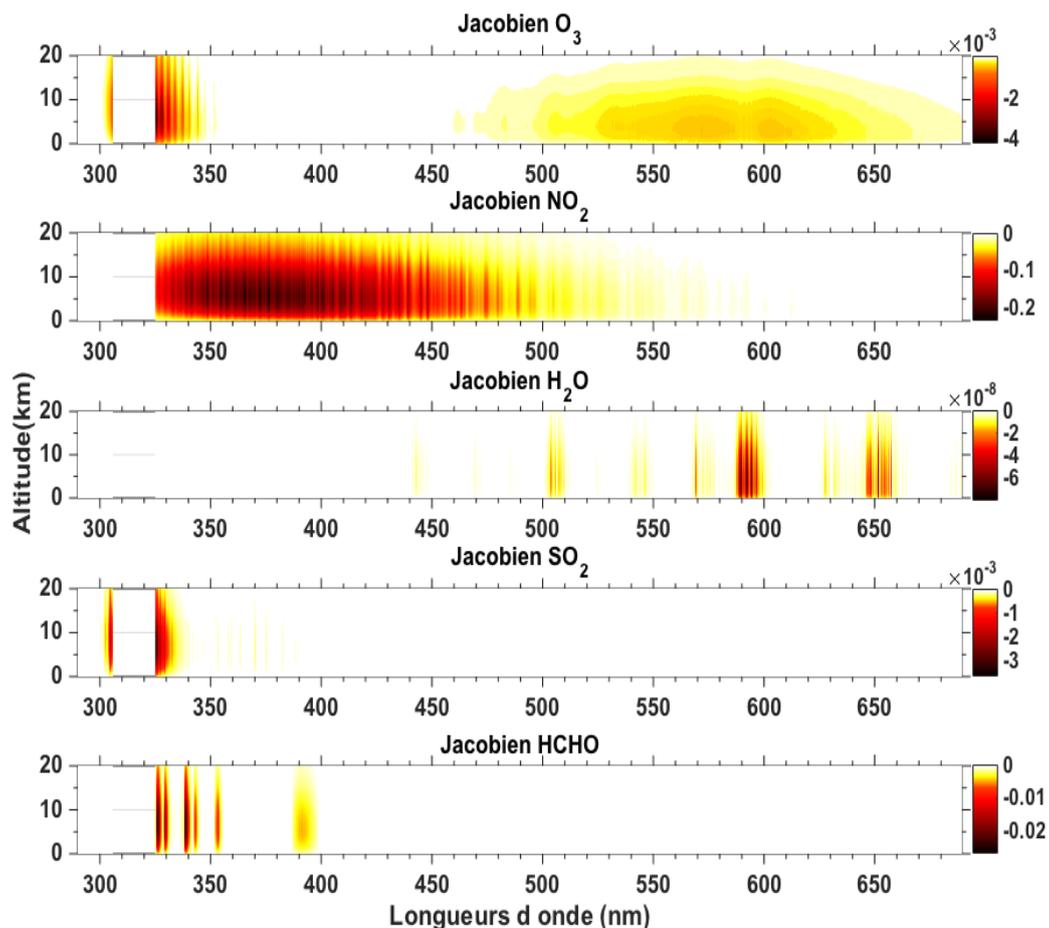


Figure 24 : Jacobiens des différents composés atmosphériques de l’étude sur l’ensemble du spectre UV-VIS entre la surface et 20 km d’altitude (ppm⁻¹)

2.2 Simulation de l’impact radiatif des aérosols

VLIDORT est conçu pour simuler l’absorption et la diffusion du rayonnement autant des gaz comme des aérosols. Ce code est considéré par la communauté scientifique comme une référence pour le calcul des multiples ordres de diffusion, effectué de manière analytique. Mon travail a été de définir les caractéristiques des aérosols présents dans la colonne atmosphérique durant les simulations. Pour les simulations, j’ai utilisé les distributions en taille des aérosols fins et grossiers typiques des latitudes moyennes, solubles dans l’eau, et leur indices de réfraction dans l’UV et le VIS, fournis par la base de données OPAC (Hess et al., 1998). Les concentrations de deux modes ont été choisies pour obtenir une épaisseur optique à 500 nm des modes fins et grossiers de 0,15 et 0,03, typiques des régions urbaines européennes.

Les résultats des calculs des jacobiens des aérosols fins et grossiers effectués avec VLIDORT sont présentés sur la figure 25. Ces jacobiens permettent d’observer leur impact non négligeable sur l’ensemble du spectre d’étude quelque soit leur diamètre.

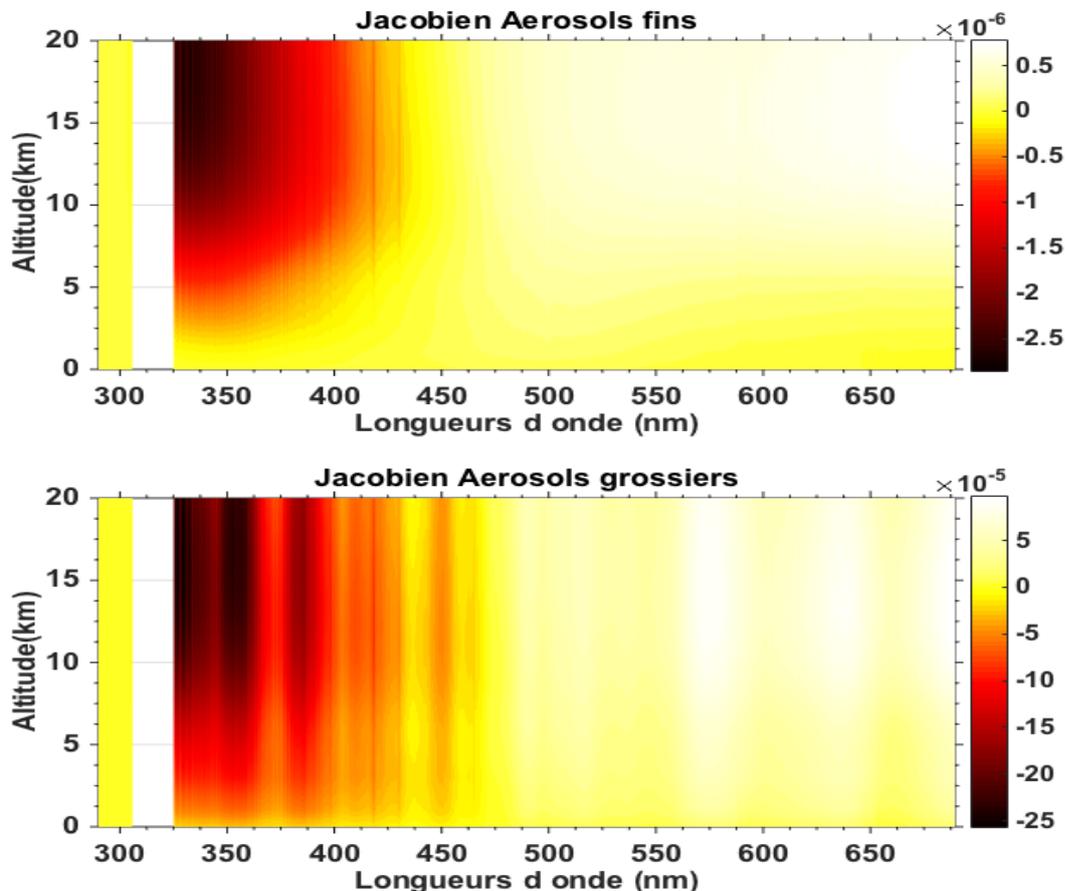


Figure 25 : Jacobiens des aérosols fin et grossiers sur l'ensemble du spectre UV-VIS entre la surface et 20 km d'altitude (ppm^{-1})

2.3 Albédo de surface à haute résolution spectrale

Une mesure de réflectance étant une mesure du rayonnement solaire réfléchi par la surface, l'albédo de surface a de ce fait un fort impact aussi bien sur la bande UV que la bande VIS. Nous avons vu dans le chapitre précédent que l'albédo de surface est défini à partir de seulement 4 mesures obtenues par OMI (à 345, 372, 418 et 499 nm). Si cette résolution spectrale est suffisante pour le couplage TIR+UV, avec l'ajout du visible il est nécessaire de mieux le représenter.

Pour cela et grâce à une collaboration étroite avec l'institut Harvard Smithsonian, j'ai implémenté dans VLIDORT la base de données de l'albédo de surface à haute résolution spectrale (similaire à celle des mesures GOME-2) mise en place par Zoogman et al. (2016). Cette méthodologie se décompose en plusieurs étapes :

- Tout d'abord la première étape consiste à mettre en place une base de données in situ d'albédo de surface dans le VIS (de 400 à 900 nm) pour différents types de sol et pour chaque saison. J'ai inclus cette base de données au code VLIDORT.

- Puis la deuxième étape consiste à effectuer une analyse en composante principale de cette base de données afin d’obtenir 4 composantes principales qui représentent au final 99% de la variabilité de la base de données.
- Ensuite, pour chaque localisation géographique, une estimation de la valeur de l’albédo de surface pour 4 longueurs d’onde (469, 555, 645 et 859 nm) est effectuée à partir des données MODIS en prenant en compte l’angle de visée satellitaire (produit opérationnel MODIS).
- Enfin, on combine les 4 valeurs d’albédo de surface correspondantes à chaque pixel satellitaire à analyser avec les 4 composantes principales pour obtenir l’albédo de surface recherché. Ce calcul est décrit par l’équation suivante :

$$\omega_0(\lambda) = (A_\omega^t A_\omega)^{-1} A_\omega^t b_{MODIS} \quad (3.1)$$

avec A_ω une matrice contenant les composantes principales à haute résolution spectrale de l’albédo de surface ω_0 et b_{MODIS} les mesures de l’albédo de surface obtenues des mesures MODIS pour 4 longueurs d’onde.

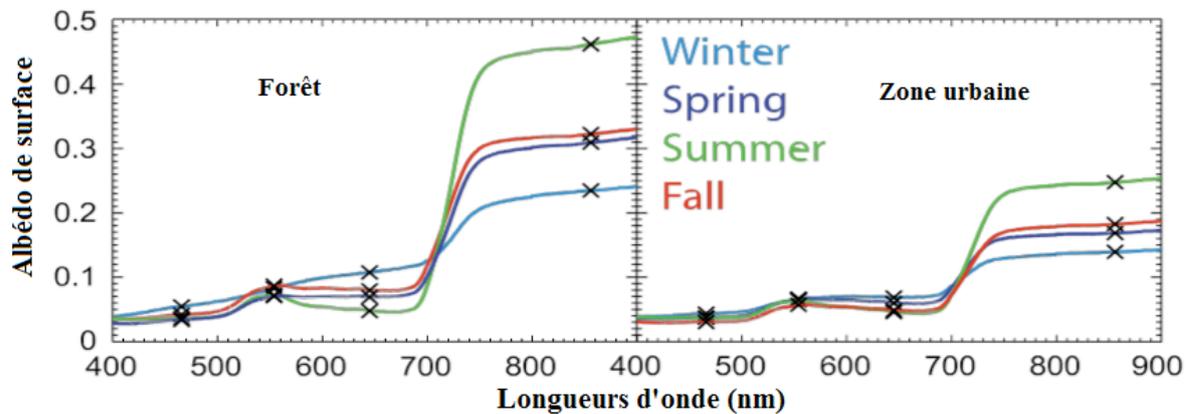


Figure 26 : Exemple d'albédo de surface de la base de données In situ dans le VIS (400-900 nm) pour la forêt et la zone urbaine pour chaque saison

La figure 26 présente deux exemples d’albédo de surface de la nouvelle base de données in situ pour le cas d’une forêt et celui d’une zone urbaine pour chaque saison et pour des longueurs d’onde allant de 400 à 900 nm. Sur ces graphiques sont également indiquées les longueurs d’ondes des 4 mesures MODIS utilisées dans cette méthode. Ainsi, en plus de permettre d’obtenir une meilleure définition spectrale, cette méthode permet une meilleure prise en compte de l’impact de la nature du sol sur la valeur de l’albédo de surface ainsi que la variabilité de cette valeur d’albédo selon les saisons. En effet, si dans les longueurs d’onde utilisées dans notre cas d’étude (entre 290 et 700nm), la valeur de l’albédo de surface varie peu en zones urbaines d’une saison à l’autre, ce n’est plus le cas lorsque l’on étudie une forêt où l’albédo va plus fortement varier selon les saisons, la composition de la végétation qui la compose variant selon les saisons. Une fois le nouvel albédo de surface obtenu, je l’ai comparé à celui utilisé pour IASI+GOME2 dans l’UV.

Les différences entre l’albédo de surface utilisé par IASI+GOME2 (issu de OMI à 4 longueurs d’onde et interpolé pour les autres) et celui obtenu avec la méthodologie de Zoogman et al., 2016 (par analyse de composantes principales couplée aux mesures MODIS) sont illustrées dans la figure 27. Les graphiques représentent la variation de

l’albédo de surface en fonction de la longueur d’ondes pour les deux albédos de surface, et pour des endroits différents, l’un à Paris, l’autre sur la Méditerranée. Les bandes bleues et jaunes représentent respectivement les fenêtres spectrales obtenues après la sélection pour l’UV et pour le VIS (voir la section 4 de ce chapitre). Les deux cartes représentent les valeurs de l’albédo de surface à 550 nm pour les deux méthodes. En haut, sur la figure qui compare donc l’albédo de surface à résolution grossière et celui à haute résolution spectrale au dessus de Paris, on remarque que l’albédo augmente pour des longueurs d’ondes supérieures à 500 nm avec la nouvelle méthode. Au contraire, sur la Méditerranée, l’albédo de surface pour des longueurs d’onde supérieures à 500 nm est plus faible avec l’albédo mieux résolu qu’avec l’autre. Ainsi, comme visible sur les deux cartes, auparavant l’albédo de surface était surestimé au dessus des océans et sous-estimé au dessus de la terre. De plus, cet albédo de surface à haute résolution considère une variation géographique sur terre, mais une unique valeur sur mer.

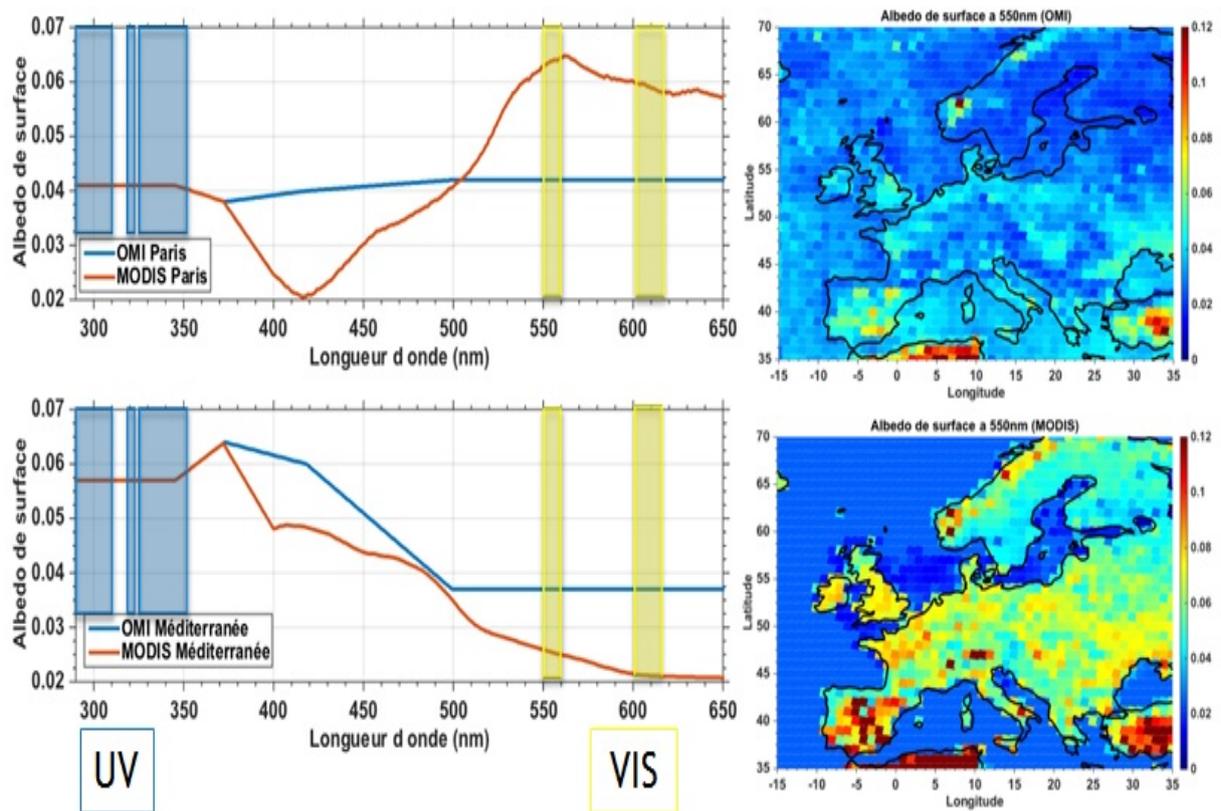


Figure 27 : Comparaison entre l’albédo de surface à résolution grossière (OMI) et celui à haute résolution spectrale (MODIS) (Zoogman et al. 2016). Comparaison spectrale à gauche pour un pixel sur Paris (en haut) et sur la Méditerranée (en bas). Les cartes à droite sont l’albédo de surface issu d’OMI (en haut) et MODIS (en bas) à 550 nm.

3 Choix des longueurs d’onde VIS pour restituer l’ozone

Pour utiliser la bande VIS pour restituer l’ozone, il est nécessaire de minimiser l’impact des incertitudes autres que l’ozone. En effet, comme on a pu le voir avec les jacobiens

des composés atmosphériques pris en compte ici (figures 24 et 25), l’impact des différents polluants sur l’ensemble du spectre d’étude reste très important, notamment pour les longueurs d’onde où l’ozone absorbe. Pour cela, il est possible, non pas d’utiliser l’ensemble du spectre UV et VIS, qui s’étend donc de 290 à 700 nm, mais de ne sélectionner que des micro-fenêtres spectrales où à la fois l’absorption de l’ozone est importante mais aussi où l’absorption des autres polluants est minimale. J’ai donc mis en place, deux méthodes distinctes pour effectuer cette sélection de longueurs d’ondes (figure 28). Ces méthodes se basent sur l’estimation des performances de l’inversion à partir des jacobiens que j’ai simulé avec le code de transfert radiatif VLIDORT et utilisent comme critère de maximisation la variable H_{O_3} , définie par Rodgers et al., 2000, appelée contenu en information sur l’ozone. Cette variable a pour formule :

$$H_{O_3} = \frac{1}{2} \ln \left(\left| \frac{S_{O_3}^a}{S_{tot}^{err}} \right| \right) \quad (3.2)$$

Elle permet de « quantifier » la qualité de la restitution de l’ozone, en comparant la variabilité naturelle a priori de l’ozone $S_{O_3}^a$ par rapport aux erreurs dans sa restitution S_{tot}^{err} (ou « variabilité » a posteriori suite à l’inversion), c’est l’entropie de l’information sur l’ozone fournie par la mesure.

Les deux méthodes distinctes suivent les principes de sélection de micro-fenêtres suivants :

- 1) La première approche consiste à fixer des seuils sur les jacobiens de chacune des variables, autres que l’ozone, afin de maximiser le contenu en information sur l’ozone H_{O_3} . Comme précisé précédemment, le jacobien, ou matrice de dérivées, est une grandeur qui permet de quantifier la variabilité de la réflectance par rapport à l’absorption ou la diffusion de rayonnement produite par l’espèce étudiée suivant leur répartition en altitude et la longueur d’onde. Ainsi cette méthode consiste à écarter toutes les longueurs d’ondes dont la valeur du jacobien est supérieure aux seuils fixés, chaque variable ayant un seuil propre. De plus, les seuils sont ajustés de manière simultanée.
- 2) La deuxième méthode analyse individuellement chaque longueur d’onde, afin de sélectionner celles qui permettent d’optimiser le contenu en information sur l’ozone H_{O_3} . Ainsi, lorsque l’ajout d’une longueur d’onde augmente la valeur de H_{O_3} , celle-ci est conservée, sinon on passe à la longueur d’onde suivante. Cette approche est mise en œuvre en suivant les travaux de Worden et al., (2004).

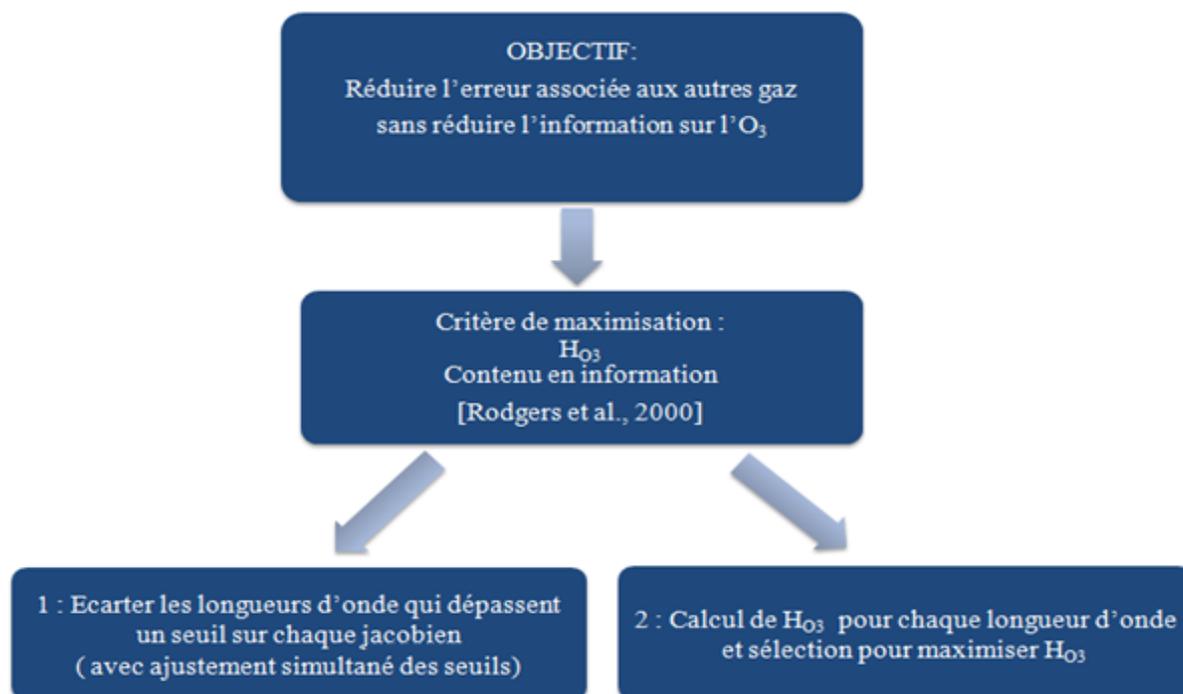


Figure 28 : Description des méthodes de sélection de longueurs d'onde de la bande UV-VIS de GOME-2

Pour calculer H_{O_3} , il est nécessaire d'estimer la matrice des erreurs totales. Par inspection des jacobiens simulés avec VLIDORT, nous avons remarqué que les spectres des bandes UV et VIS sont affectés par les multiples variables listées dans le tableau 6. Utilisant les jacobiens simulés par VLIDORT et formulations développées par Rodgers (2000) et Worden et al. (2006), nous pouvons estimer les erreurs de restitution de l'ozone dans l'UV et le visible. Ces formulations théoriques sont des outils puissants pouvant estimer statistiquement les erreurs sur la restitution d'une variable (ici le profil vertical d' O_3) par inversion d'un spectre par la méthode d'estimation optimale ou Tikhonov-Philips, uniquement à partir des jacobiens et des matrices de variances-covariances des variables (concentrations des gaz, aérosols ou bruit).

	Impact sur le spectre de Réflectance	
	d'une espèce gazeuse	d'une variable
UV - bandes de Hartley et Huggins	O_3 NO_2 HCHO SO_2	AOD Nuages Albédo de surface
VIS – bande de Chappuis	O_3 NO_2 H_2O	AOD Nuages Albédo de surface

Tableau 6 : Bilan des impacts sur les bandes de Hartley et de Huggins (UV) et sur la bande de Chappuis (VIS)

Tenant en compte le tableau 6, les erreurs prises en compte dans le calcul sont :

$$S^{tot} = S^{smooth} + S^{mes} + S_f^{NO2} + S_f^{HCHO} + S_f^{SO2} + S_f^{H2O} \quad (3.3)$$

Les erreurs associées aux incertitudes associées à l’albédo de surface et les aérosols ne sont pas prises en compte ici car la sélection des micro-fenêtres ne réduit pas significativement leurs erreurs étant donnée leur impact « bande large » sur l’ensemble du spectre UV-VIS.

Avec l’estimation de S^{tot} et la matrice de covariance de l’ozone S_a (a priori) estimée à partir de la climatologie de McPeters et al. (2007), nous avons mis en œuvre les deux méthodes de la figure 28. Les résultats obtenus à partir des deux sélections de longueurs d’ondes sont comparés dans le tableau 7 par rapport à l’utilisation des bandes larges : l’ensemble des bandes de l’ozone de Hartley (290-305 nm), Huggins (325-340nm) et Chappuis (500-650 nm). Le tableau renseigne pour chaque méthode la valeur de H_{O_3} , l’erreur moyenne de la surface à 60 km d’altitude et l’erreur moyenne de la surface à 3 km d’altitude. Les fenêtres ou micro-fenêtres spectrales choisies sont illustrées graphiquement sur la Figure 29.

	H_{O_3}	Erreur moyenne (0-60 km)	Erreur moyenne (0-3 km)
Bandes spectrales larges	6,98	37,1 %	30,8 %
1) Méthode de seuils	10,32	12,9 %	18,7 %
2) Calcul pour chaque longueur d’onde	10,36	11,7 %	17,2 %

Tableau 7 : Comparaison des performances des deux méthodes de sélection de longueurs d’onde par rapport à l’utilisation des bandes spectrales larges

Les sélections de longueurs d’onde obtenues à partir des deux méthodes permettent toutes deux d’augmenter sensiblement le contenu en information, ce dernier passant d’environ 7 à plus de 10,3 pour les deux méthodes par rapport à l’utilisation des bandes larges. Egalement, elles diminuent l’erreur moyenne entre la surface et 60 km de plus d’un facteur 3, et l’erreur moyenne entre la surface et 3 km de presque moitié. De plus, si les différences entre les résultats obtenues sont assez faibles, c’est la méthode de sélection basée sur le calcul pour chaque longueur d’onde qui permet, pour chacun des critères de comparaison, d’obtenir de meilleurs résultats. C’est donc cette sélection de longueurs d’onde qui est conservée et qui sera utilisée pour la suite de la thèse.

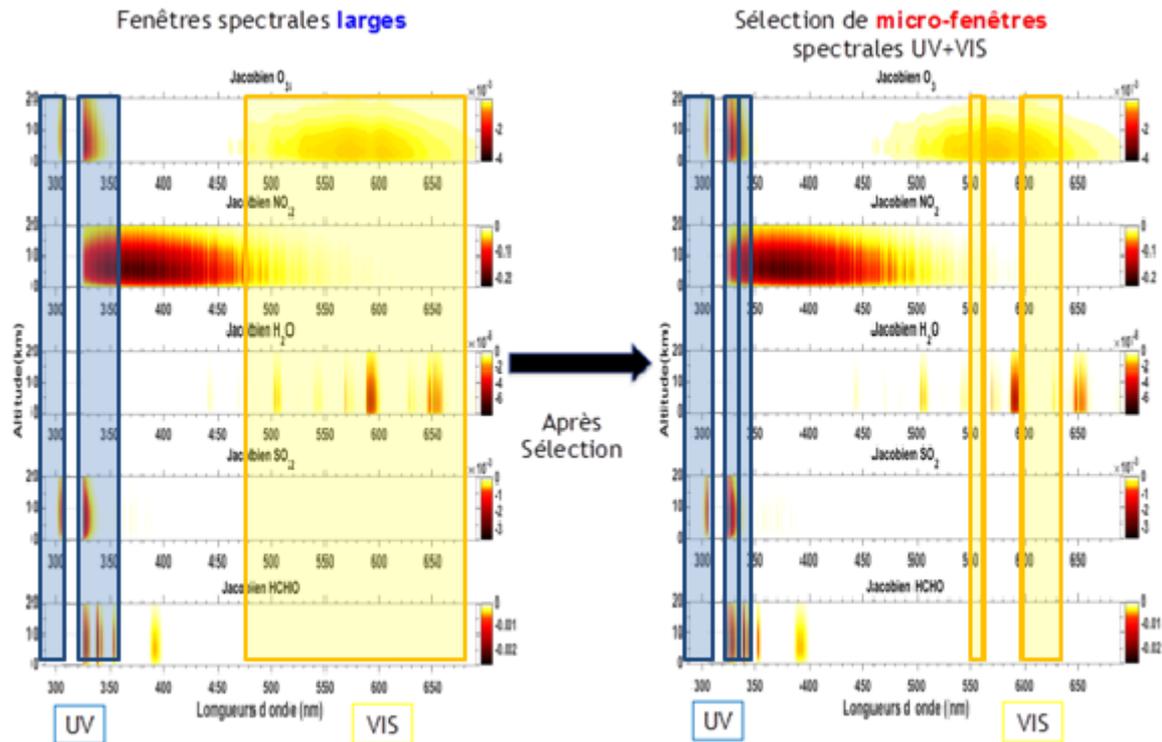


Figure 29 : Comparaison des choix des longueurs d’ondes (zones bleues pour l’UV et jaunes pour le VIS) pour la restitution de l’ozone : (gauche) des bandes spectrales larges de Hartley + Huggins + Chappuis et (droite) la sélection de micro-fenêtres spectrales UV+VIS avec la méthode 2 de la figure 28. Les jacobiens des principales espèces gazeuses interférentes sont illustrés en fond.

La figure 30 présente une estimation des erreurs dans la restitution de l’ozone utilisant l’ensemble du spectre UV et VIS, en échelle logarithmique. Sur la légende, « S_{aO3} » représente la variabilité a priori du profil d’ozone (avant la mesure), « S_{mes} » l’erreur sur l’ O_3 induite par le bruit radiométrique de la mesure, « S^{smooth} » l’erreur sur l’ O_3 associée au lissage vertical par la méthode d’inversion, « S_{fX} » l’erreur sur l’ O_3 associée à la variable « X » et enfin « S^{tot} » l’erreur totale sur l’ O_3 (somme de toutes les contributions). La figure indique que l’erreur prédominante est associée à la vapeur d’eau, notamment dans les couches de l’atmosphère les plus proches de la surface, puis dans un second temps les erreurs associées au dioxyde d’azote, au lissage et au bruit radiométrique.

La figure 31 présente donc l’estimation des erreurs de restitution de l’ozone pour chaque variable mais cette fois utilisant uniquement la sélection des longueurs d’onde conservées dans l’UV+VIS. On peut remarquer que suite à l’utilisation de cette sélection de longueurs d’onde, les erreurs associées à la vapeur d’eau et au dioxyde d’azote, qui étaient donc auparavant majoritaires, ont très nettement diminuées notamment dans les couches atmosphériques proches de la surface. Dans cette configuration, les erreurs les plus importantes sont dorénavant les erreurs associées au bruit radiométrique de GOME-2 et au lissage.

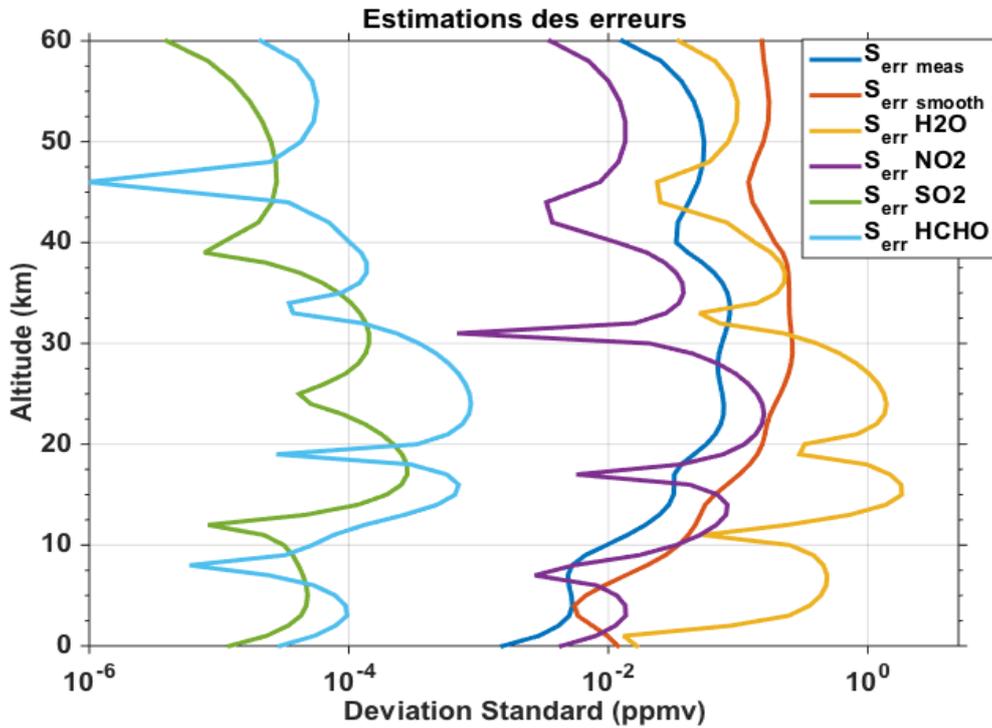


Figure 30 : Erreurs dans la restitution de l'ozone associés aux espèces gazeuses sur l'ensemble du spectre UV et VIS

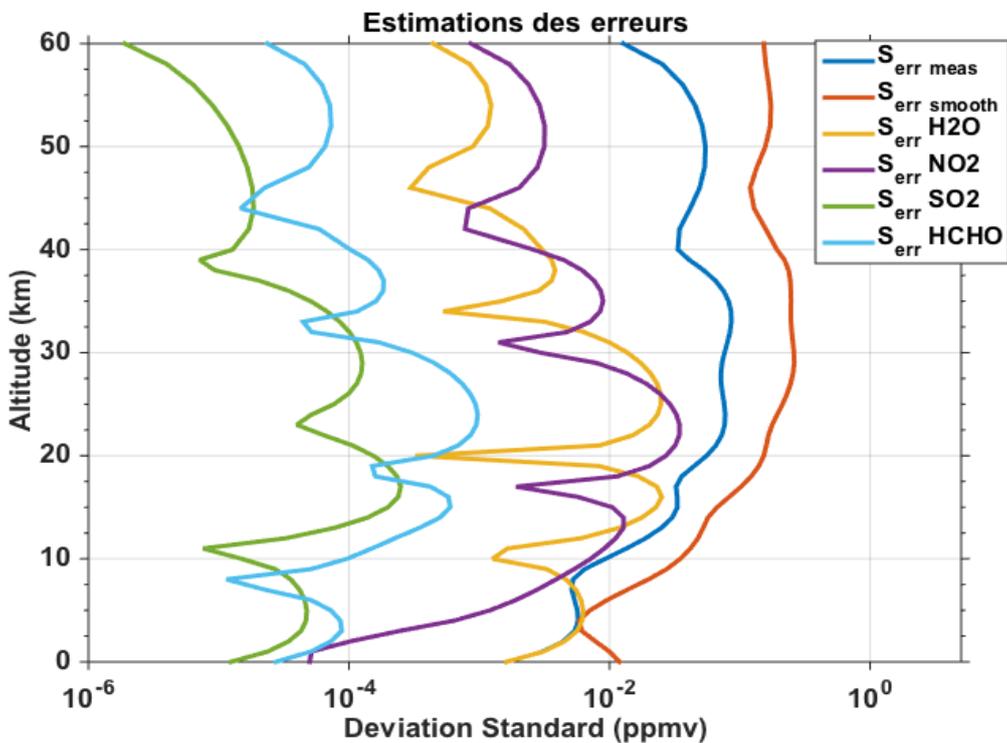


Figure 31 : Estimation des erreurs dans la restitution de l'ozone pour chaque variable sur les longueurs d'onde obtenues après la sélection de longueurs d'onde de la bande UV-VIS de GOME-2

Ce travail de sélection de longueurs d’onde a donc permis de nettement diminuer l’erreur totale de restitution de l’ozone en atténuant notamment les erreurs associées à la vapeur d’eau et au dioxyde d’azote. Ainsi, le contenu en information augmente grandement, passant d’environ 7 à un peu plus de 10, l’erreur moyenne est réduite de plus de la moitié, et malgré la diminution importante du nombre de longueurs d’onde utilisées (de 2216 à 362), les DOFS restent presque inchangés passant de 4,7 à 4,5 entre 0 et 60 km et de 0,48 à 0,46 entre 0 et 3 km d’altitude.

4 Sélection des variables d’ajustement associées à la bande VIS

Une fois diminuées les incertitudes sur la restitution de l’ozone associées aux composés atmosphériques gazeux, j’ai analysé les impacts « bande large », comme ceux des aérosols et l’albédo de surface. En effet, comme l’ont montré les jacobiens, les aérosols ont un impact non négligeable sur tout le spectre, ainsi que l’albédo de surface. J’ai ainsi ajouté ses composés à ceux déjà pris en compte et j’ai effectué une estimation des erreurs associées à chacun de ces composés. Les résultats de cette estimation sont représentés sur la figure 32. On remarque que les aérosols fins comme grossiers, ont bien un impact important sur les bandes UV et surtout VIS, avec une erreur associée aux aérosols bien supérieures aux autres termes. Enfin, on observe également l’erreur très élevée associée à l’albédo de surface. Ainsi, avec la prise en compte des aérosols et de l’albédo de surface, l’erreur est extrêmement élevée. Par ailleurs, l’erreur associée à l’incertitude sur le profil vertical de température a été estimée négligeable par rapport aux termes majoritaires.

Des tests des nouvelles sélections de longueurs d’onde en prenant en compte les erreurs issues des aérosols et de l’albédo de surface ont été effectués. Cependant, cette méthode n’a pas permis d’obtenir des résultats satisfaisants. En effet, étant donné l’impact très important des aérosols sur l’ensemble du spectre la méthode de sélection de longueurs d’onde par optimisation du contenu en information H_{O_3} aboutit à un faible nombre de longueurs d’onde sélectionnées, la majorité des longueurs d’onde du spectre ayant été écartée. Cela implique donc une trop grande perte d’informations sur l’ozone.

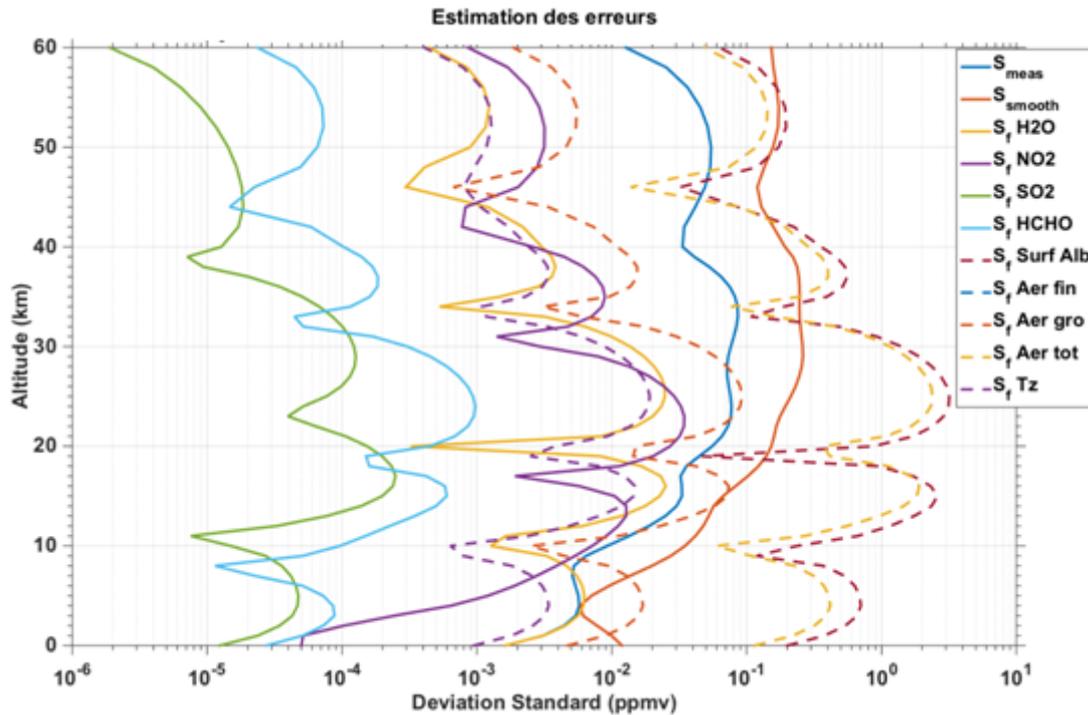


Figure 32 : Estimation des erreurs pour la sélection de longueurs d’onde UV+VIS et considérant l’impact des aérosols, du profil de température et de l’albédo de surface, en ajustant uniquement le profil d’O₃

L’alternative choisie pour réduire ces effets de « bande large » est l’ajustement de ces variables conjointement au profil d’ozone lors de l’inversion. Dans ce cas, une partie de l’information apportée par les spectres GOME-2 est utilisée pour restituer des valeurs de concentrations d’aérosols et de l’albédo de surface, en plus du profil d’ozone. Ainsi, j’ai considéré l’ajustement conjoint de l’ozone, des concentrations des aérosols et d’une correction polynomiale sur l’albédo de surface. Cette dernière est déjà mise en œuvre dans la méthode IASI+GOME2 pour la bande UV. Pour estimer l’amélioration de cette approche d’ajustement des multiples variables, j’ai effectué une estimation des erreurs associées aux aérosols et à l’albédo de surface en les prenant en compte comme des erreurs croisées, et non systématiques (pour les cas des valeurs climatologiques, voir le chapitre 2). Les résultats de cette estimation sont montrés dans la figure 33. On remarque que, contrairement à la figure 32, les erreurs associées aux aérosols et à l’albédo de surface diminuent fortement, de tel sorte que dorénavant ce sont les erreurs de lissage et celle associées au bruit radiométrique qui sont les plus importantes. L’erreur totale moyenne sur la très basse troposphère (sous 3 km d’altitude) diminue très fortement, obtenant 14%, soit une valeur adéquate pour la restitution de l’ozone. Enfin, à cette forte diminution de l’erreur sur la restitution de l’ozone dans la très basse troposphère s’ajoute une diminution légère du contenu en information sur l’ozone et des DOFs.

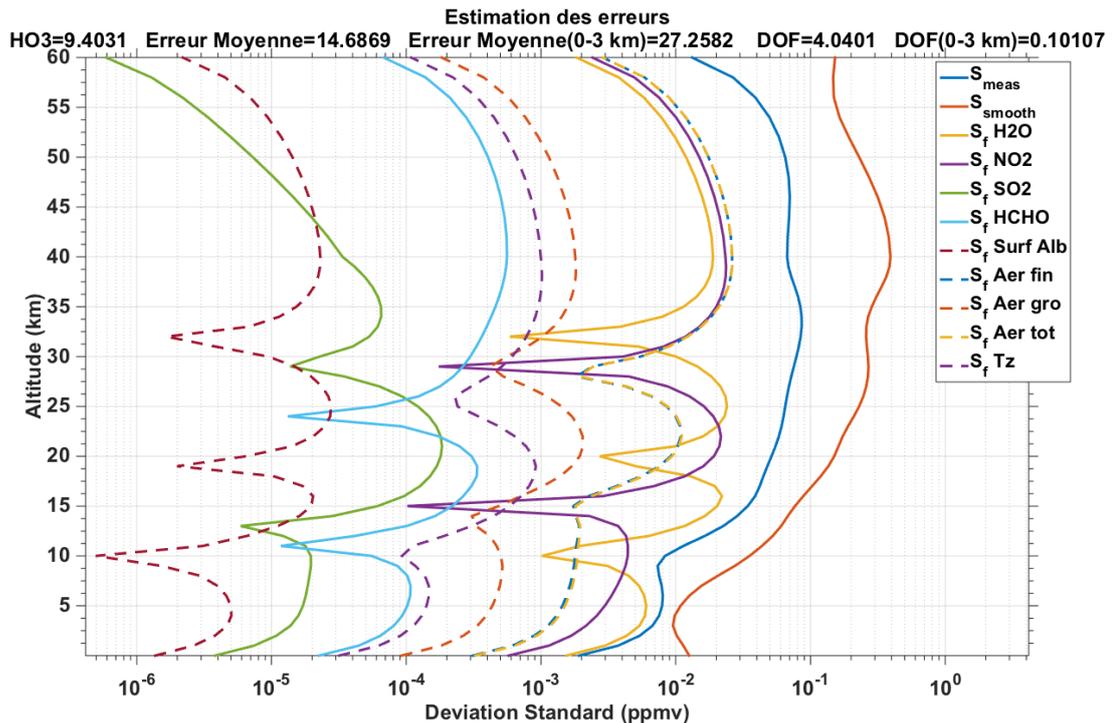


Figure 33 : Estimation des erreurs considérant la sélection de longueurs d’onde UV+VIS, en ajustant conjointement le profil d’O₃, les aérosols fin et grossiers et l’albédo de surface

5 Estimation des erreurs des restitutions de l’ozone UV, VIS et UV+VIS

La méthode de restitution de l’ozone dans le VIS développée dans cette thèse a été déterminée via l’utilisation du code VLIDORT adapté au visible, la sélection des longueurs d’onde UV+VIS des spectres GOME-2 avec la méthode 2 de la Figure 28 et l’ajustement conjoint de l’albédo de surface et des aérosols. Dans cette section, nous fournissons une estimation finale des erreurs associées aux restitutions de l’ozone dans les bandes UV, VIS et UV+VIS et de la sensibilité de ces approches représentée par les AVKs. Ces estimations sont présentées dans les figures 34 à 36. Les erreurs associées aux différentes variables sont exprimées en pourcentage par rapport au profil de concentration moyenne d’O₃.

Nous remarquons que pour la bande spectrale de l’UV l’erreur la plus importante est l’erreur de lissage qui représente plus de 90 % de l’erreur totale (Figure 34). Son maximum, situé à 10 km est à un peu moins de 35 %, alors que le maximum de l’erreur totale situé à la même altitude est légèrement supérieur à 35%. La deuxième erreur la plus importante est l’erreur associée au bruit radiométrique qui atteint un maximum de 15 % à 5 km d’altitude, puis à la même altitude, l’erreur due au dioxyde d’azote (moins de 10%). La figure 34 à droite représente les AVK en fonction de l’altitude, ou noyaux moyens, pour le domaine spectral UV. La valeur de degrés de liberté pour les 6 premiers kilomètres uniquement (DOF6) est également indiquée. L’estimation de l’AVK nous permet de voir que la restitution a une sensibilité qui s’étend entre 1 et 15 km avec un maximum situé à environ 5 km d’altitude.

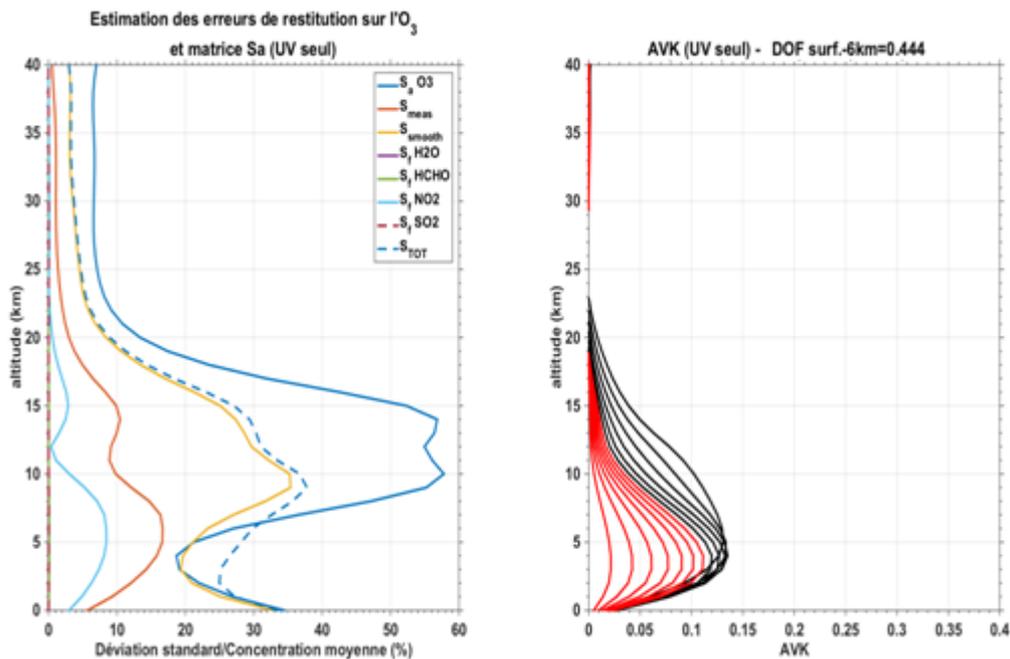


Figure 34 : Erreurs significatives dans la restitution de l'ozone (gauche) et noyaux moyens (droite) AVK de la méthode UV seul. Les AVK entre 0 et 6 km sont en rouge et entre 7 et 12 km en noir.

Pour la restitution VIS seul (Figure 35), l’erreur totale atteint son maximum à 12 km d’altitude avec 30-35 %, dont 75% correspondent à l’erreur de lissage. L’erreur associée au bruit radiométrique de la mesure ainsi qu’à l’eau et au dioxyde d’azote, pourcentages les plus importants après l’erreur de lissage, atteignent un maximum d’environ 20 % à 8 km d’altitude pour les deux premières citées et à 5 km pour la troisième. Enfin, avec des maximums situés également à 5 km d’altitude, les aérosols (environ 15%) et la température (environ 10%) sont les deux autres variables dont l’erreur est non négligeable. Ainsi, on peut observer que dans la bande visible, certaines variables, comme la vapeur d’eau ou le lissage vertical, engendrent une erreur plus importante que pour le cas de la bande UV. L’estimation de l’AVK nous permet quant à elle de voir que la restitution est sensible entre 1 et 10 kilomètres de l’atmosphère, donc est moins étendue que dans le cas de l’UV. Cependant le pic le plus important, et donc le maximum de sensibilité, est situé à environ 1 km de la surface, donc plus proche que pour l’UV, ce qui est très prometteur pour la mesure de l’ozone dans la couche limite atmosphérique.

L’erreur totale du couplage UV+VIS (Figure 36) est plus faible que pour les cas d’une seule bande spectrale. L’erreur maximale est légèrement inférieure à 35%, située à la même altitude que dans les deux cas précédents. Cela peut s’expliquer par une diminution de l’erreur associée au bruit radiométrique (10 % au maximum contre près de 20 % pour le visible et 15 % pour l’UV). Les autres variables dont l’erreur reste non négligeable sont le dioxyde d’azote (10 %) ainsi que la vapeur d’eau (4 %).

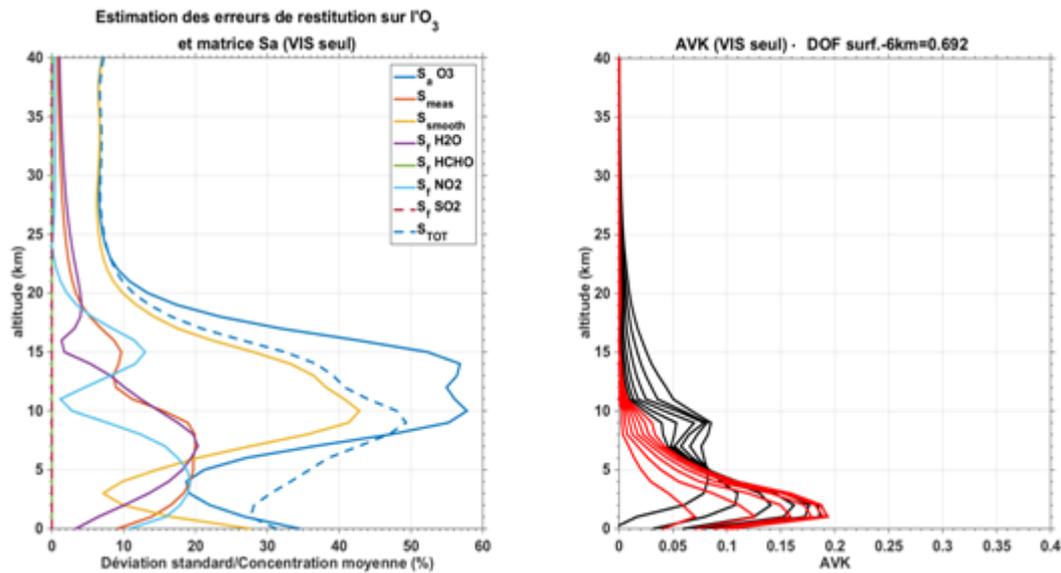


Figure 35 : Idem de la figure 34 mais pour la méthode VIS seul

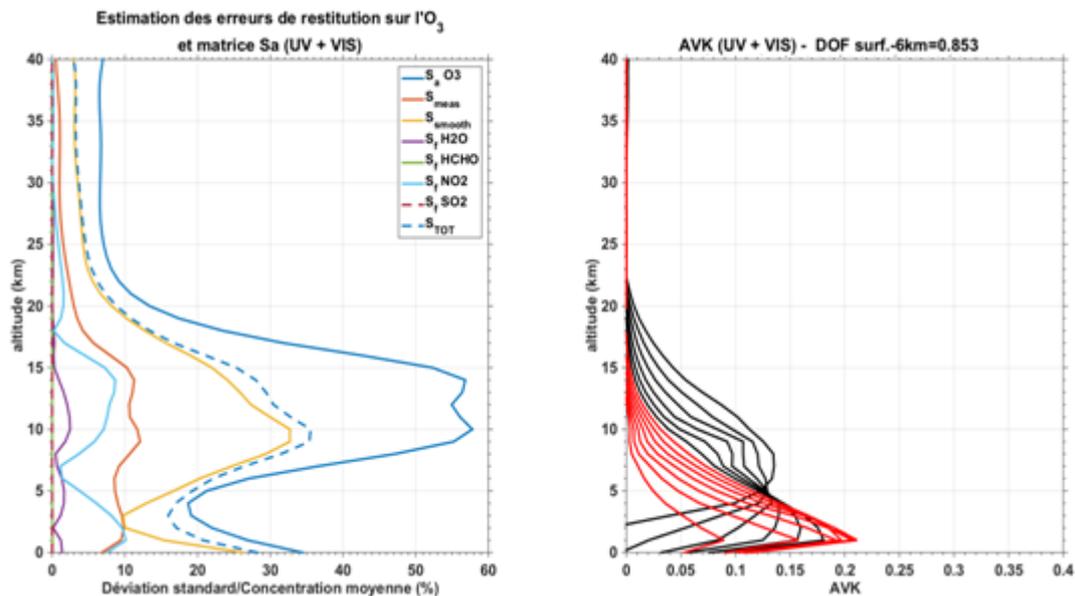


Figure 36 : Idem de la figure 34 mais pour la méthode UV+VIS

Avec l’ajout de l’UV, la sensibilité de la restitution dans les deux premiers kilomètres de l’atmosphère est plus importante. De plus, la valeur de DOF6 a augmenté de 0,16 par rapport à la « configuration visible seul » et de 0,41 par rapport à la « configuration UV seul », ce qui indique un apport d’information plus important avec cette configuration. Ainsi, le couplage UV+VIS permet d’amener plus d’information et augmente la sensibilité dans la troposphère, plus particulièrement au niveau de la surface, tout en diminuant l’erreur.

6 Tests de sensibilité

Par la suite, une fois l’impact des différents polluants sur la restitution de l’ozone minimisé grâce à cette nouvelle sélection de longueurs d’ondes et à l’ajustement conjoint de l’ozone avec les aérosols et l’albédo de surface, différents tests de sensibilité ont été effectués afin d’évaluer l’influence d’autres paramètres comme l’albédo de surface ou encore la présence ou non de nuages lors du passage du satellite.

6.1 Impact de l’albédo de surface sur la réflectance terrestre

La figure 37 représente la variation de la réflectance observée entre 250 et 700 nm pour plusieurs localisations avec un albédo de surface différent. Les localisations choisies sont des mesures différentes qui correspondent à divers types de surface : l’Italie et l’Allemagne (zones urbaines), la France (Parc Naturel Régional de Millevaches en Limousin), les Pyrénées (région montagneuse à la frontière France-Espagne), la Tunisie et la Lybie (zones désertiques) et la Méditerranée (proche des côtes françaises). Nous pouvons remarquer dans la figure que l’augmentation de l’albédo de surface entraîne une augmentation de la valeur de la réflectance. De plus, on peut apercevoir qu’au-delà de 400 nm ce phénomène s’accroît à mesure que la longueur d’onde augmente. Ainsi, l’albédo de surface a un impact sur la réflectance majoritairement dans le domaine du visible et cette différence de réflectance a un impact majeur sur la restitution de l’ozone.

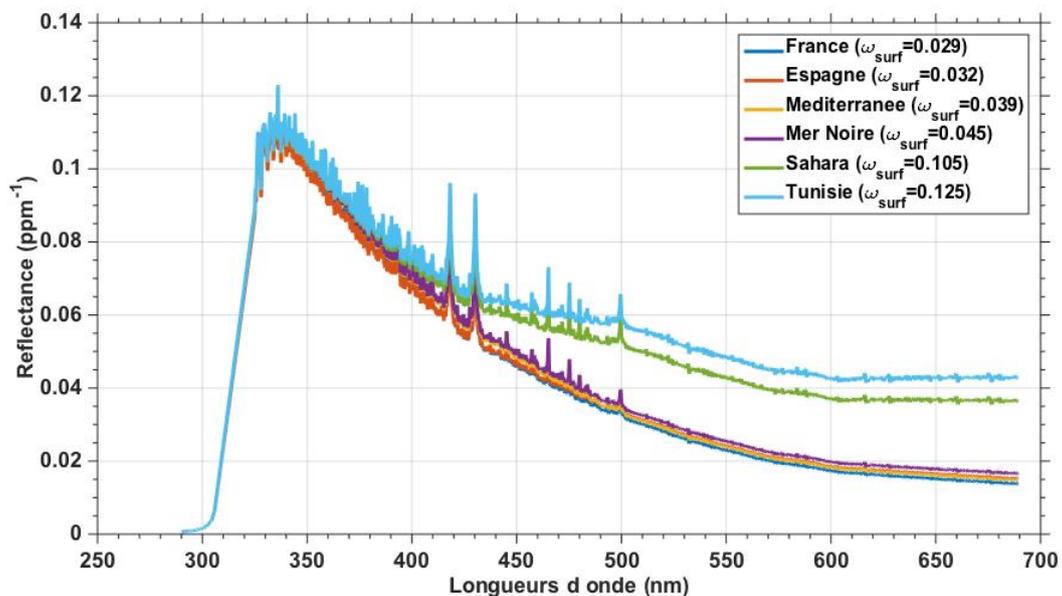


Figure 37 : Analyse de l’influence de l’albédo sur le spectre de réflectance

La figure 38 présente les résultats obtenus pour les 7 localisations pour les erreurs associées à l’ozone, à savoir l’erreur associée au bruit radiométrique, l’erreur de lissage et l’erreur totale qui correspond donc à la somme des deux autres erreurs. On peut remarquer tout d’abord que la variation de localisation et donc de l’albédo de surface impacte majoritairement l’erreur associée au bruit radiométrique. En effet, on peut voir dans un premier temps que les valeurs d’albédo de surface les plus élevées, donc les albédos des déserts de Tunisie et Lybie, augmentent grandement la valeur de S_{meas} dans

les 5 premiers kilomètres de la surface, augmentation que l’on retrouve également au dessus de 11 km. En revanche, pour ces valeurs plus élevées d’albédo, entre 6 et 10 km d’altitude, la valeur de S_{meas} est plus faible que pour les cas à plus faible albédo. Pour les autres localisations, la différence entre les valeurs de S_{meas} obtenues est nettement moins marquée. Pour le cas de l’erreur de lissage et de l’erreur totale sur l’ozone, le constat est le même. Les cas d’albédo désertique se démarquent de nouveau des autres cas, avec cette fois-ci des erreurs légèrement plus faibles dans les 5 premiers kilomètres de l’atmosphère quand l’albédo est plus élevé et une différence moins marquée entre les albédos désertiques et les autres cas.

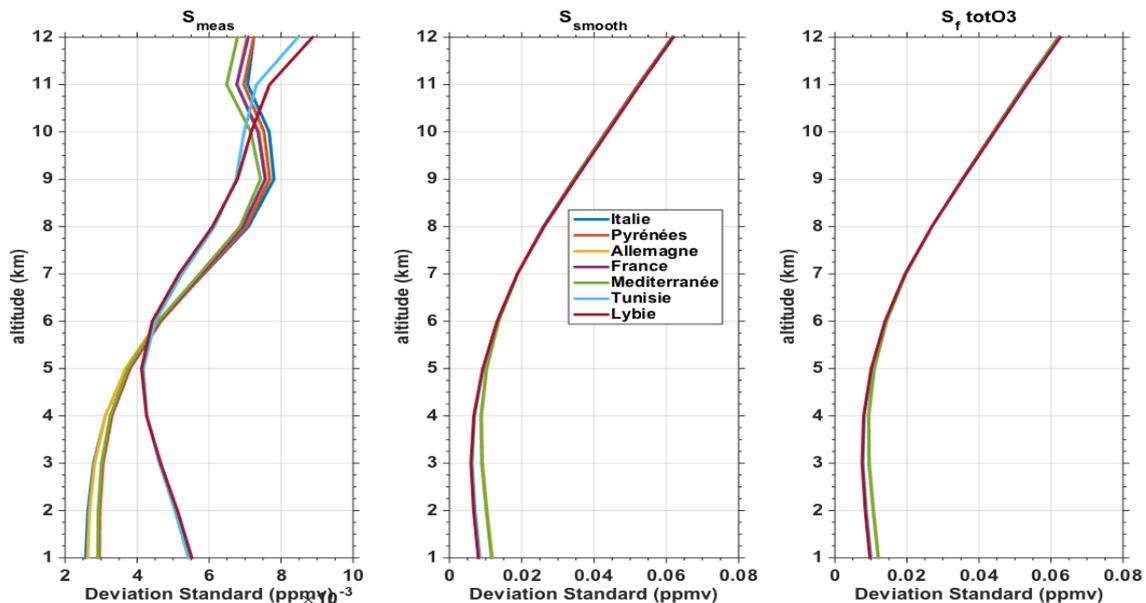


Figure 38 : Variation de l’erreur associée au bruit radiométrique, de l’erreur de lissage et de l’erreur totale sur l’ozone selon la localisation du point de mesure

La variation d’albédo de surface sur les erreurs associées aux gaz atmosphériques (H_2O , HCHO, NO_2 et SO_2) est illustrée dans la figure 39. De nouveau, on remarque des valeurs très différentes entre les cas d’albédos désertiques, de valeurs plus élevées donc, et les autres cas et cela pour les 4 composés atmosphériques. En effet pour H_2O et NO_2 on observe des comportements similaires avec des erreurs pour la Tunisie et la Lybie plus importantes de la surface à environ 6 km d’altitude, puis des erreurs proches des autres cas d’étude entre 6 et 8 km, des erreurs plus importantes entre 8 et 12 km d’altitude avec une erreur qui augmente grandement avec l’altitude. Pour le HCHO et le SO_2 , les erreurs pour les cas d’albédo désertiques sont moins importantes que celles des autres cas au dessus de 6 km d’altitude.

Sur les 5-6 premiers kilomètres de l’atmosphère, on remarque en zones désertiques les erreurs de restitution augmentent. De plus, les tests de sensibilité ont montré que l’augmentation de la valeur de l’albédo de surface entraîne une augmentation des DOFs et donc de la sensibilité.

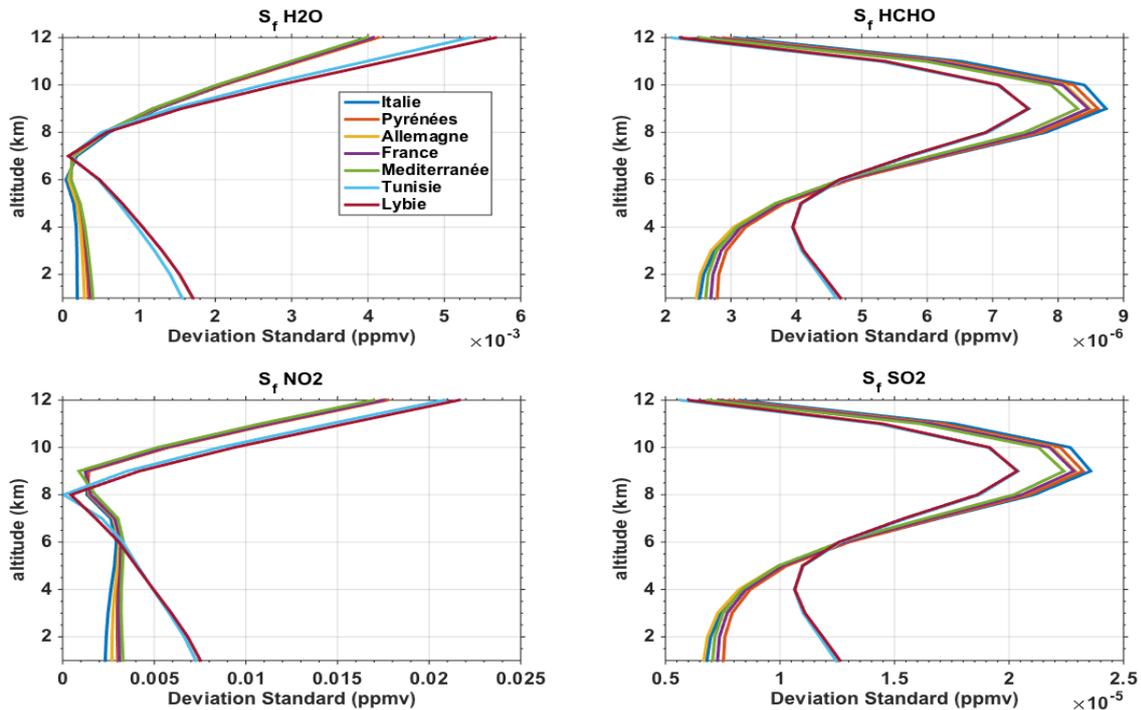


Figure 39 : Variation de l’erreur associée à la vapeur d’eau, au formaldéhyde, au dioxyde d’azote et au dioxyde de soufre selon la localisation du point de mesure

6.2 Influence de la couverture nuageuse

La figure 40 présente les résultats des tests de sensibilité effectués sur la réflectance par rapport à la présence ou non de nuage. Ici, deux configurations ont été choisies, avec un ciel sans nuage (configuration choisie par défaut jusque là) et avec un ciel 100% recouvert. Nous pouvons remarquer qu’avec la présence de nuages, la réflectance augmente sur tout le spectre mais aussi que, si il y a beaucoup plus de pics et que ceux-ci sont plus intenses, la valeur de la réflectance est, en moyenne, plus homogène avec la longueur d’onde. En effet, alors que dans le cas sans nuage la réflectance est bien plus forte dans l’UV que dans le visible, cette différence diminue fortement avec la présence de nuages.

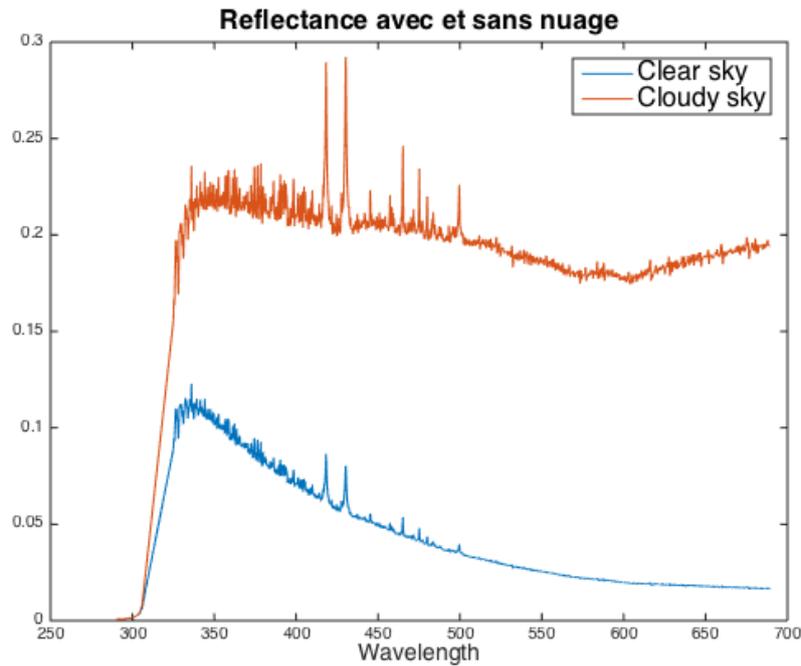


Figure 40 : Analyse de l'influence des nuages sur la réflectance

6.3 Angles de visée du satellite

Des tests de sensibilité sur l'orientation de l'appareil de mesure GOME-2 et donc plus précisément sur l'impact de la variation des angles de mesure du satellite ont été effectués. Ces trois angles sont le Viewing Zenith Angle (VZA) ou l'angle entre le zénith et le satellite, le Solar Zenith Angle (SZA) ou l'angle entre le zénith et l'axe reliant le point d'observation au Soleil et enfin l'Azimuth Angle (AZM) ou l'angle entre le plan vertical du satellite et une direction de référence, ici le nord (voir figure 41). Théoriquement les deux angles VZA et SZA varient de 0 à 90° et l'AZM varie de 0 à 180°.

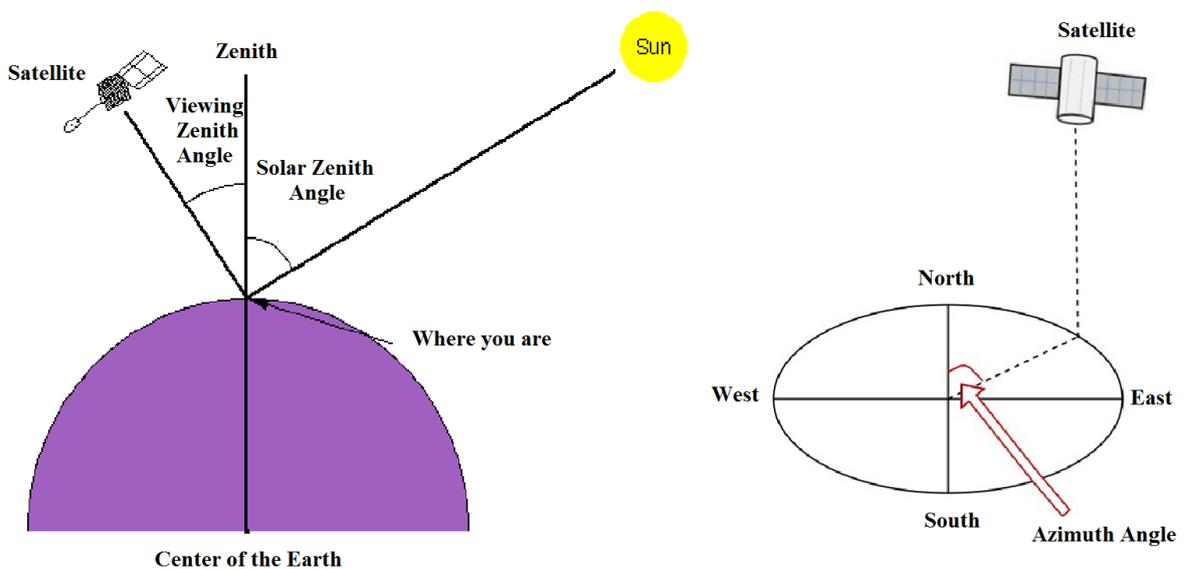


Figure 41 : Localisation des 3 angles satellitaires VZA, SZA et AZM

La figure 42 représente l’histogramme des angles solaires zénithaux SZA pour une journée de mesure de GOME-2 au-dessus de l’Europe. On peut ainsi voir que cet angle varie entre 30 et 60° et l’analyse des données montre que le plus grand nombre de mesures s’effectue entre 38 et 52°. En effet sur près de 17 000 mesures, environ les trois quarts se situent dans cet intervalle. Les valeurs plus faibles correspondent au sud de l’Europe et la Méditerranée (plus proche des tropiques) et les plus élevées au nord de l’Europe et l’Atlantique nord (proche du cercle polaire).

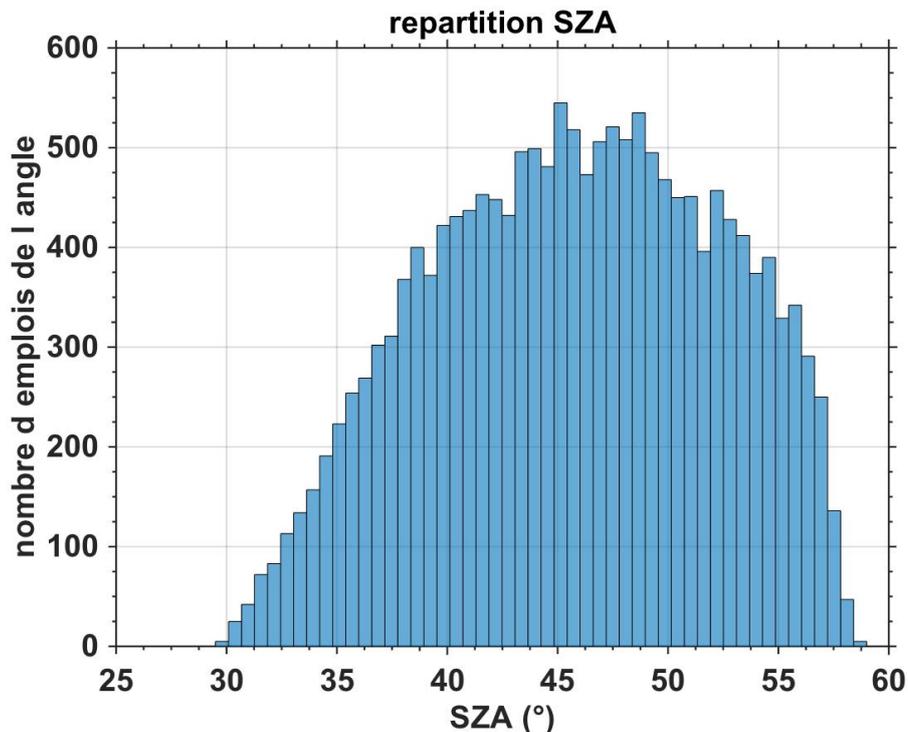


Figure 42 : Répartition des valeurs d’angle pour le cas des angles solaires zénithaux (SZA) pour une journée en été de mesure de GOME-2 sur l’Europe

La variation de l’angle solaire zénithal SZA sur la sensibilité de la restitution est significative (Figure 43). Plus la valeur de l’angle SZA est petite, plus la valeur des DOFs est élevée. Dans ce cas le soleil vise la terre de manière plus perpendiculaire et donc le signal de réflectance est plus élevé. Sur l’intervalle des valeurs de SZA qui comprend les trois quarts des mesures (entre 38 et 52°), on remarque que la variation de la valeur des DOFs n’est pas très importante. Pour la colonne 0-6 km, les DOFs varient entre 0,43 et 0,39 environ sur cet intervalle. Des comportements similaires pour les deux autres angles de visée du satellite VZA et AZM sont aussi remarqué.

Quant aux erreurs associées au bruit radiométrique et au lissage (Figure 44), des variations de l’angle SZA n’induisent presque pas de changements. Les seules variations remarquées sont par rapport à l’altitude. Des résultats similaires ont été trouvés pour les deux autres angles de visée.

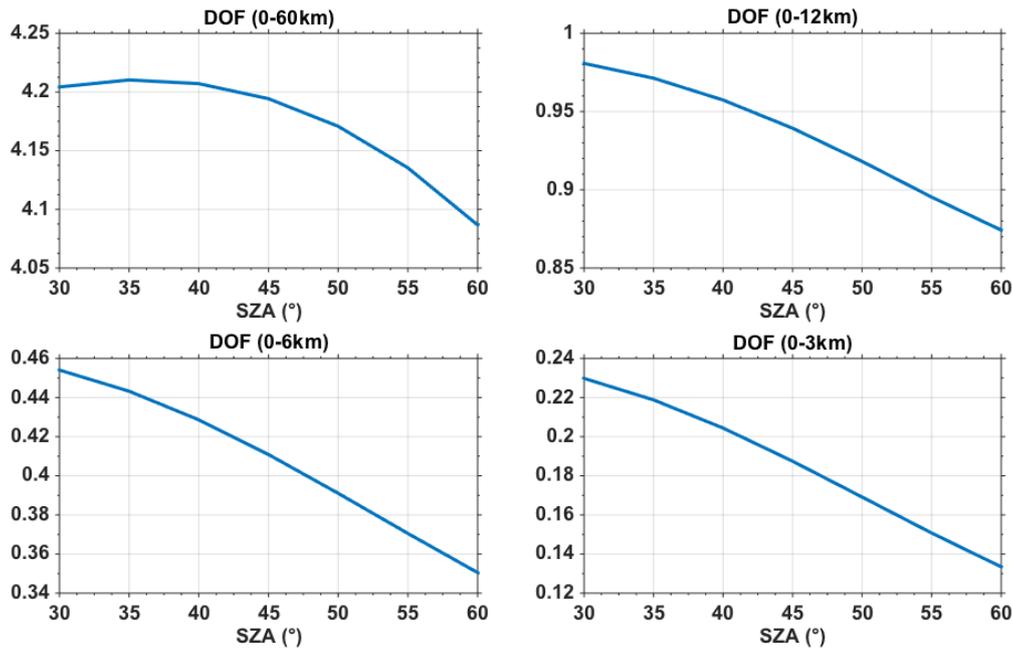


Figure 43 : Variation des DOFs selon la valeur de l'angle SZA pour différentes épaisseurs d'atmosphère

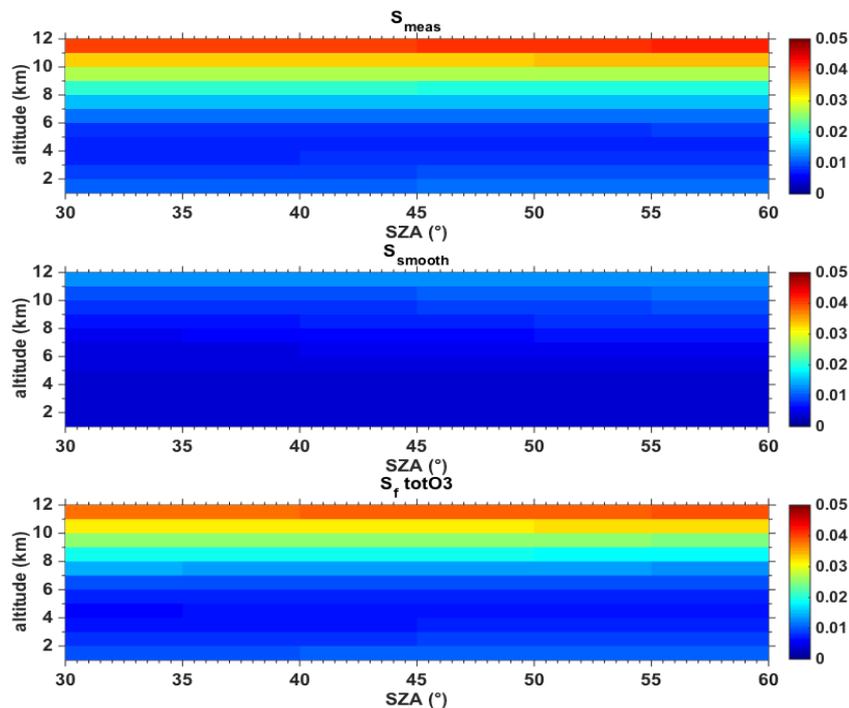


Figure 44 : Evolution de l’erreur associée au bruit radiométrique, de l’erreur de lissage et de l’erreur totale sur l’ozone en fonction de l’angle SZA

L’ensemble de ces tests a ainsi mis en lumière deux paramètres importants à prendre en compte au vue de leur impact sur la bande du visible : l’albédo de surface et la présence de nuages.

7 Conclusions

Afin de pouvoir inverser les profils d’ozone, il est nécessaire de fournir aux modules de transfert radiatif et d’inversion un ensemble de données et des caractéristiques d’entrée, comme nous avons pu le voir dans le chapitre 2. Ainsi, dans ce chapitre sont regroupés l’ensemble des démarches et développements mis en œuvre afin d’obtenir toute les données nécessaires pour coupler la bande VIS au sein du module d’inversion. C’est ce travail de recherche et d’estimation de paramètres qui est appelé « développement de la méthode VIS ».

Ainsi dans une première partie, les bases de données du modèle de transfert radiatif VLIDORT ont été complétées afin de pouvoir étendre le spectre simulé de réflectance jusqu’au visible. De plus, au cours de cette recherche dans la littérature, un autre composé atmosphérique, le formaldéhyde, a été ajouté à VLIDORT du fait de sa présence dans l’atmosphère et de son absorption significative à la fois dans l’UV et le VIS. Les étapes suivantes du développement ont été i) la prise en compte de l’impact radiatif des aérosols dans les simulations VLIDORT, à travers le choix d’un modèle d’aérosol représentatif des conditions en latitudes moyennes, et ii) la modification de la base de données d’albédo de surface. En effet, si cet albédo plutôt grossier étant suffisant pour l’inversion dans l’UV, une résolution plus fine est nécessaire pour la bande VIS.

Une fois développée l’approche de restitution de l’O₃ dans le VIS, les erreurs associées à chaque variable ont pu être estimées pour la Bande VIS seule, UV seule et UV+VIS. Cette étude a permis de montrer, dans un premier temps un doublement de la valeur de DOFs en ajoutant la bande VIS à l’UV, mais également une erreur totale trop élevée.

Par la suite, j’ai effectué une sélection de longueurs d’onde afin de diminuer cette erreur en prenant comme critère de maximisation la variable H₀₃ appelée contenu en information sur l’ozone (Rodgers, 2000). Cette sélection, qui a amené une forte diminution du nombre de longueurs d’onde (de plus de 2200 initialement à 362) a également permis de réduire l’erreur totale tout en gardant une valeur de DOF très proche (de 0,48 à 0,46 entre 0 et 3km d’altitude). La valeur du critère de maximisation est d’ailleurs passée de 7 à plus de 10. L’erreur qui a connu la plus forte diminution avec cette sélection est l’erreur associée à la vapeur d’eau. La diminution importante du nombre de longueurs s’explique d’ailleurs par le fait qu’une grande partie des longueurs d’onde où la vapeur d’eau absorbe ont été écartée.

Par la suite, les aérosols fins et grossiers et l’albédo de surface ont été également pris en compte, ce qui a fait fortement augmenter l’erreur totale de restitution à l’O₃, y compris en ne choisissant que les longueurs d’onde nouvellement sélectionnées. Pour faire diminuer cette erreur, j’ai donc choisi d’ajuster conjointement à l’O₃, les aérosols fins et grossiers et l’albédo de surface. Les résultats obtenus montrent une très forte diminution des erreurs associées à ces variables ajustées, permettant ainsi d’obtenir une erreur totale entre la surface et 3 km d’altitude de moins de 30%, ce qui est un bon résultat étant donné les impacts importants des aérosols et de l’albédo sur le VIS.

Pour finir, divers tests de sensibilité ont été effectués sur cette méthode VIS et ont confirmé l’impact non négligeable de la présence ou non de nuage sur la mesure de réflectance, ainsi que l’impact de l’albédo de surface sur les estimations d’erreur associées à certains polluants en partie mais surtout sur l’erreur due au bruit radiométrique.

Chapitre 4 :

Simulations des observations satellitaires de l’ozone par couplage multispectral avec la bande visible de Chappuis

Le développement de la méthode VIS a permis de minimiser fortement les erreurs de restitution de l’ozone tout en maximisant l’information sur sa répartition verticale. J’ai donc par la suite mise en œuvre un couplage de la bande VIS avec les bandes UV et TIR, en utilisant comme point de départ la méthode à deux bandes IASI+GOME2 développée précédemment au laboratoire LISA. L’étape suivante consiste donc à utiliser ce couplage UV+VIS+TIR sur des observations.

Mais lors du développement d’une méthode de détection de polluants, il est important de tester cette dernière sur des observations simulées par un modèle, pour ensuite le faire sur des mesures réelles. En effet, utiliser dans un premier temps des simulations d’observations permet de tester la méthode avec des conditions initiales maîtrisées et mieux définies. De même, un simulateur permet aussi d’évaluer les performances des futures observations multispectrales de l’ozone exploitant l’absorption de l’ozone dans le visible, comme c’est le cas de la mission géostationnaire MAGEAQ. Pour simuler les observations satellitaires, on utilise le modèle de chimie-transport MOCAGE comme conditions initiales atmosphériques et de surface.

1 Simulateur des observations multispectrales de l’ozone

Afin d’estimer les performances des nouveaux couplages multispectraux, j’ai mis en place un simulateur d’observation. Les approches à étudier sont la méthode à 3 bandes spectrales UV+VIS+TIR avec les mesures de IASI et GOME-2 et le couplage TIR+VIS avec l’instrument géostationnaire MAGEAQ, en les comparant avec les restitutions à une bande spectrale. C’est une méthode d’analyse de sensibilité qui permet de quantifier la valeur ajoutée d’une approche d’observation. Cette méthode peut être notamment utilisée lors du développement des appareils d’observations spatiales puisqu’elle permet d’estimer leur valeur ajoutée avant leur fabrication en connaissant simplement leurs caractéristiques. En simulant ainsi les performances des observations issues de ses appareils, on peut estimer si la précision obtenue est suffisante ou non et ajuster les caractéristiques instrumentales si nécessaire. La méthodologie que j’ai utilisée pour mon étude est schématisée sur la figure 45.

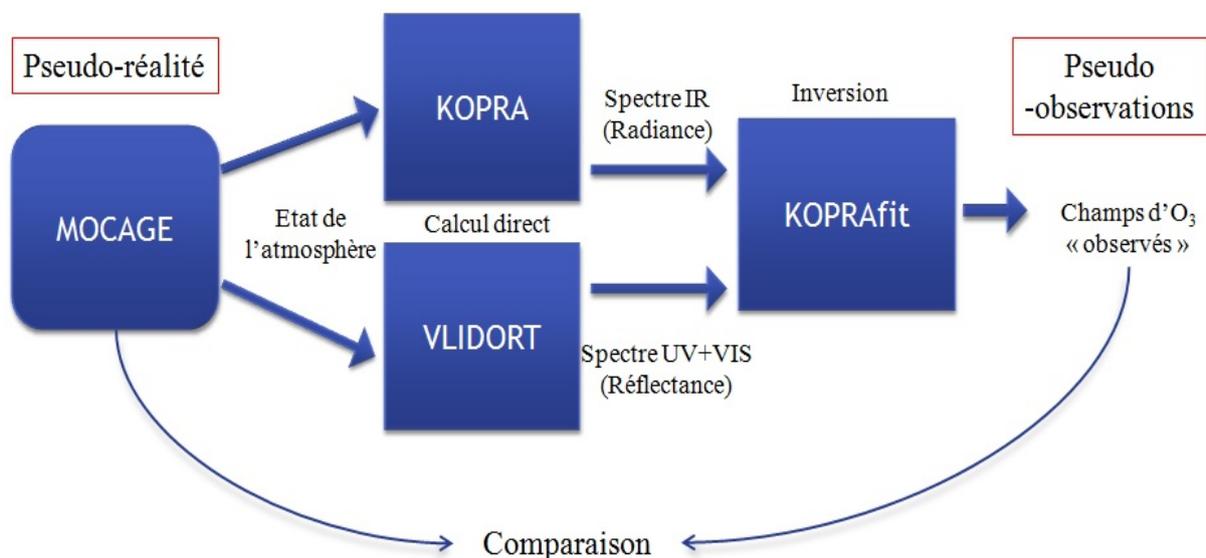


Figure 45 : Schéma du simulateur d’observation mis en place dans cette étude

Tout d’abord, nous avons utilisé le modèle MOCAGE, dont les sorties serviront de pseudo-réalité, afin de simuler un état de l’atmosphère réaliste (Costantino et al., 2017). Ses pseudo-réalités sont ensuite fournies aux modèles de transfert radiatif KOPRA et VLIDORT et servent ainsi de données d’entrée. Par calcul direct, KOPRA et VLIDORT produisent respectivement un spectre de radiance (TIR) et un spectre de réflectance (UV+VIS). Enfin, ces spectres sont fournis au module KOPRAfit qui a pour rôle de les inverser afin de pouvoir obtenir des champs d’O₃ dit « observés » ; ce sont les pseudo-observations. Ainsi, pour juger les performances du couplage spectral étudié, on compare la pseudo-réalité, fournie par le modèle MOCAGE, avec les pseudo-observations obtenues après inversion. Cette méthode permet donc de visualiser comment les couplages étudiés, et en particulier comment le couplage à trois ou deux bandes spectrales, « observent » les concentrations d’ozone fournis par le modèle.

2 La pseudo-réalité

2.1 Le modèle MOCAGE

Des analyses du modèle MOCAGE, pour « MOdèle de Chimie Atmosphérique à Grande Echelle », mises en œuvre au laboratoire CERFACS sont utilisées comme pseudo-réalité pour le simulateur des observations satellitaires d’ozone (figure 45). Des nombreuses mesures réelles de la répartition de l’ozone provenant des réseaux de stations de surface (AIRBASE), du produit IASI développé au LA (Dufour et al., 2012) et de MLS (Microwave Limb Sounder) ont été assimilées dans le modèle afin d’obtenir une représentation la plus réaliste possible de la variabilité horizontale de l’ozone au niveau de la surface, de la troposphère libre et de la stratosphère, respectivement (voir Emili et al., 2014 pour la configuration de MOCAGE et l’assimilation de ces produits satellitaires de l’ozone). L’assimilation est effectuée à l’échelle horaire avec un algorithme 3D-Var, décrit par Jamouillé et al. (2012). Cette même pseudo-réalité est utilisée pour simuler les performances du couplage futur à 2 bandes IASI-NG+UVNS par Costantino et al., 2017, étude où j’ai contribué et dont je suis co-auteur.

Les analyses MOCAGE fournissent la pseudo-réalité des profils verticaux de l’état de l’atmosphère (gaz, nuages, variables météorologiques) et la surface sur une base horaire pour l’épisode de pollution à l’ozone entre le 8 et le 11 juillet 2010 en Europe. Le modèle décompose l’atmosphère en 47 niveaux inégaux en dimensions jusqu’à 35 km d’altitude puisque la grille verticale passe de 40 m dans la Couche Limite Atmosphérique ou CLA (basse troposphère) à environ 1 km (stratosphère), avec une résolution horizontale de 0,2 x 0,2 degrés sur l’Europe.

2.2 Comparaison entre MOCAGE et des mesures réelles de IASI+GOME2

Afin de tester la fiabilité des concentrations d’ozone de la pseudo-réalité, une comparaison entre les concentrations entre 0 et 3 km d’altitude de MOCAGE et celles obtenues à partir des mesures réelles de IASI+GOME2 a été effectuée.

La figure 46 présente la pseudo-réalité fournie par MOCAGE avec une carte de concentration d’O₃ entre la surface et 3 km d’altitude pour la journée du 8 juillet 2010 (gauche) et un graphique représentant les histogrammes normalisées des concentrations d’O₃ pour les mesures réelles de IASI+GOME-2 en noir, la pseudo-réalité de MOCAGE en rouge et la pseudo-réalité lissée par les AVKs de IASI+GOME2 en bleu. On constate une cohérence globale entre les sorties du modèle MOCAGE et les concentrations obtenues à partir des mesures IASI+GOME2, aussi bien en terme d’amplitude des données de concentration de l’ozone qu’en terme de distribution spatiale. Le modèle semble surestimer très légèrement la concentration moyenne globale de moins de 1 DU (Dubson Units), en comparant les observations réelles (noir) et la pseudo-réalité lissée par les AVK du produit satellitaire (bleu). L’écart plus

important entre les mesures réelles et MOCAGE est lié principalement à la sensibilité réduite de IASI+GOME2 à l’ozone à la surface. La différence positive de 0,74 DU entre la pseudo-réalité lissée par les AVKs et les données IASI+GOME2, même si très faible, pourrait être liée à la sous-estimation systématique de la fraction nuageuse par MOCAGE (voir section 2.3.1). En effet, comme MOCAGE sous-estime la couverture nuageuse, il surestime par conséquent la production d’ozone. Enfin, on remarque que l’écart-type pour les mesures réelles de IASI+GOME2 est plus important que celui des sorties MOCAGE lissées par AVK. Ce fort écart-type pour IASI+GOME2 et cette faible variabilité de MOCAGE pourraient être dus d’une part au bruit radiométrique des données satellitaires mais également à la variabilité naturelle plus grande pour les données réelles que pour les simulations du modèle.

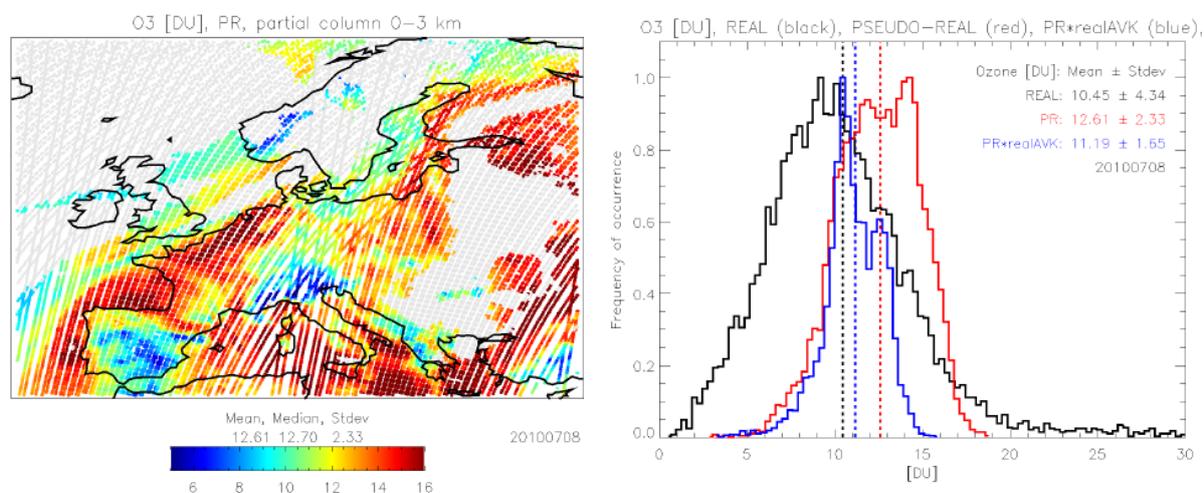


Figure 46 : Simulations fournies par MOCAGE pour la journée du 8 juillet 2010. Pseudo-réalité de la concentration d’O₃ entre la surface et 3 km d’altitude (gauche) et distribution de fréquence normalisée des concentrations d’O₃ pour les mesures réelles IASI+GOME2 (noir), la pseudo-réalité de MOCAGE (rouge) et la pseudo-réalité lissée par les AVKs de IASIGOME-2 (Costantino et al., 2017)

2.3 Modifications empiriques des sorties MOCAGE

Afin de simuler correctement la sensibilité des méthodes de restitution de l’ozone au plus proche de la réalité, les performances des restitutions simulées et réelles de IASI+GOME2 ont été comparées. Des différences significatives sous-estimant les performances de IASI+GOME2 par rapport à la réalité ont été remarquées en utilisant directement les sorties de MOCAGE comme données d’entrée du simulateur. Suite aux analyses des différences entre les entrées réelles et celles issues des simulations, nous avons constaté la nécessité de corriger les deux paramètres principaux affectant la sensibilité des restitutions : le contraste thermique entre la surface et l’atmosphère pour l’infrarouge thermique et la fraction nuageuse pour l’ultraviolet-visible. Nous avons comparé les sorties de MOCAGE par rapport aux observations réelles et apporté des corrections empiriques pour trois variables (décrites par la suite) : la température de surface, le profil de température et la fraction nuageuse. Ces corrections ont été développées dans le cadre de l’article de Costantino et al., 2017.

2.3.1 Couverture nuageuse

Nous avons remarqué que MOCAGE sous-estime fortement la couverture nuageuse (CF pour Cloud Fraction) qui ne dépasse jamais la valeur de 0,3. Par conséquent, nous avons estimé une conversion empirique de la fraction nuageuse de MOCAGE à des valeurs plus réalistes utilisées comme données d'entrée pour les pseudo-réalités. Pour cela, nous avons comparé pour l'ensemble de la période d'étude la fraction nuageuse de MOCAGE avec les couvertures nuageuses restituées à partir des mesures réelles de GOME-2 avec l'algorithme FRESCO (Koelemeijer et al., 2001) pour les mêmes jours et la même région que les simulations. Pour les pixels où la couverture nuageuse était inférieure à 0,3, nous avons défini deux facteurs de correction qui réduisent l'écart entre les histogrammes des fractions nuageuses et les valeurs moyennes de deux ensembles de données. Comme l'algorithme d'inversion IASI+GOME2 n'est pas sensible à la présence d'O₃ lorsque la couverture nuageuse est supérieure à 0,3, ces pixels nuageux sont exclus. Enfin, pour corriger l'estimation de la couverture nuageuse de MOCAGE, on effectue pour chaque pixel le calcul suivant :

$$CF^{Pseudo} = 20,7 \times (CF_{MOCAGE}^{1,2}) \quad (5.1)$$

où CF_{MOCAGE} représente la fraction nuageuse d'origine fournie par le modèle. Nous supposons de plus la présence de nuages bas uniquement pour le niveau de pression de 700 hPa.

2.3.2 Température de surface Ts

Afin d'obtenir la température de surface à fournir comme donnée d'entrée au modèle MOCAGE, nous avons utilisé les sorties du modèle ARPEGE. Par la suite, nous avons comparé les températures de surface (Ts) fournies par ARPEGE avec les observations réelles restituées à partir des spectres IASI dans l'algorithme IASI+GOME2, puisqu'il est possible de remonter à une valeur de Ts à partir de mesures dans l'infrarouge thermique (TIR). La figure 47 présente les cartes de température de surface dérivées de mesures IASI réelles (à gauche) et fournies par le modèle ARPEGE (à droite). Seuls les pixels dont la température de surface est comprise entre 5 et 45°C et où la différence absolue de Ts entre les mesures réelles et ARPEGE est inférieure à 10°C sont pris en compte. On peut observer à première vue sur ces cartes une sous-estimation de Ts par ARPEGE sur terre (observable notamment sur la Turquie ou la partie Est de l'Europe) et une surestimation sur mer (observable par exemple en Mer Baltique).

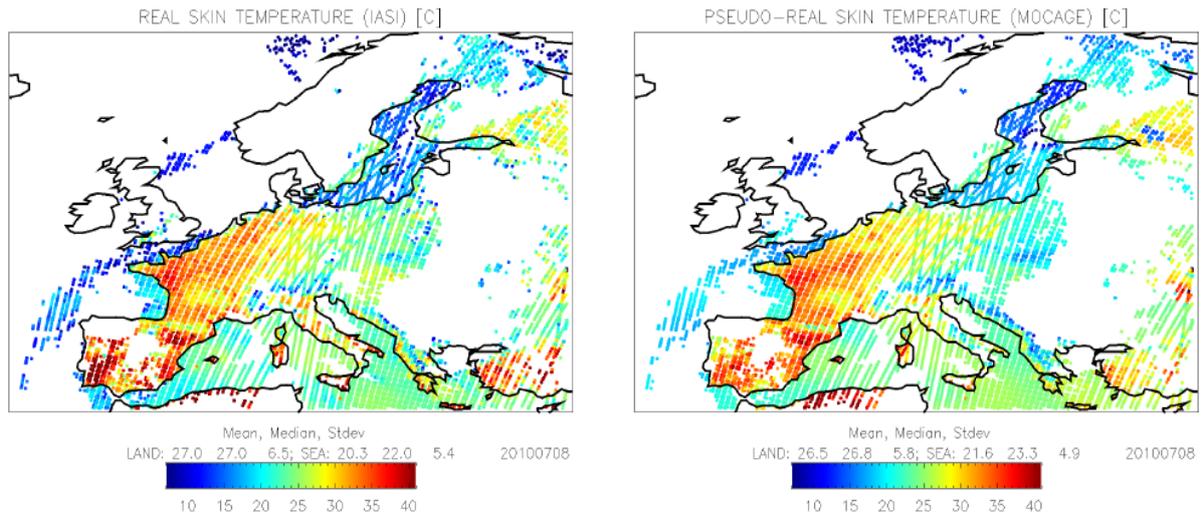


Figure 47 : Cartes de température de surface T_s pour les mesures réelles de IASI (gauche) et la pseudo-réalité de ARPEGE (droite) avant correction pour la journée du 8 juillet 2010 (Costantino et al., 2017)

La figure 48, qui présente les mêmes données que précédemment mais ici sous forme d'histogrammes normalisés de T_s , permet de confirmer ses remarques. En effet, ces différences sont notables sur toute la période du 8 au 11 juillet 2010 avec des différences moyennes entre T_s réelles et T_s ARPEGE de $-1,42\text{ °C}$ sur mer et $+0,67\text{ °C}$ sur terre. Ces valeurs sont ainsi utilisées pour corriger les valeurs de T_s de ARPEGE sur terre et sur mer (équation 5.2).

$$T_s^{Pseudo} = T_s^{ARPEGE} + Correction \quad (5.2)$$

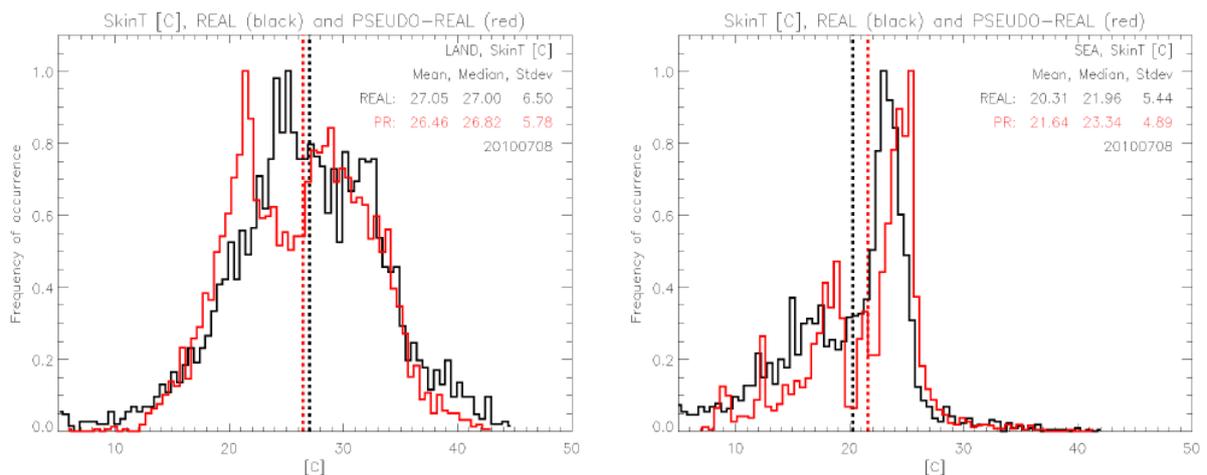


Figure 48 : Histogrammes normalisés de T_s pour les mesures réelles de IASI (noir) et la pseudo-réalité de ARPEGE (rouge) au dessus de la terre (gauche) et au dessus de la mer (droite) (Costantino et al., 2017)

2.3.3 Profil vertical de température T(z)

L’analyse des profils de température a mis en évidence que ARPEGE surestime également la température de l’atmosphère dans les 6 premiers km d’altitude, or c’est à cette altitude que l’on cherche à mesurer avec précision les concentrations d’O₃ troposphérique. Pour toute la période, la différence moyenne entre Ts réelle et Ts ARPEGE est égale à -2,69°C (entre 0-1 km d’altitude), -1,41°C (1-2 km), -1,51°C (2-3 km), -1,14°C (3-4 km), -0,88°C (4-5 km) et -0,51°C (5-6 km). Ainsi, afin de considérer des contrastes thermiques réalistes pour la pseudo-réalité, nous avons utilisé ces valeurs pour modifier les températures de ARPEGE (équation 5.3) avant d’effectuer des calculs radiatifs et des algorithmes d’inversion.

$$T_{(z)}^{Pseudo} = T_{(z)}^{ARPEGE} + Correction(z) \quad (5.3)$$

3 Période d’analyse : un épisode estival de pollution à l’ozone en Europe

Une fois le développement du simulateur d’observation achevé, une comparaison des résultats d’observation de l’ozone troposphérique par IASI, IASI+GOME2 et IASI+GOME3 a été effectuée. La période d’étude choisie pour cette comparaison s’étend du 8 au 11 juillet 2010, période qui correspond à un épisode de pollution d’O₃ en Europe.

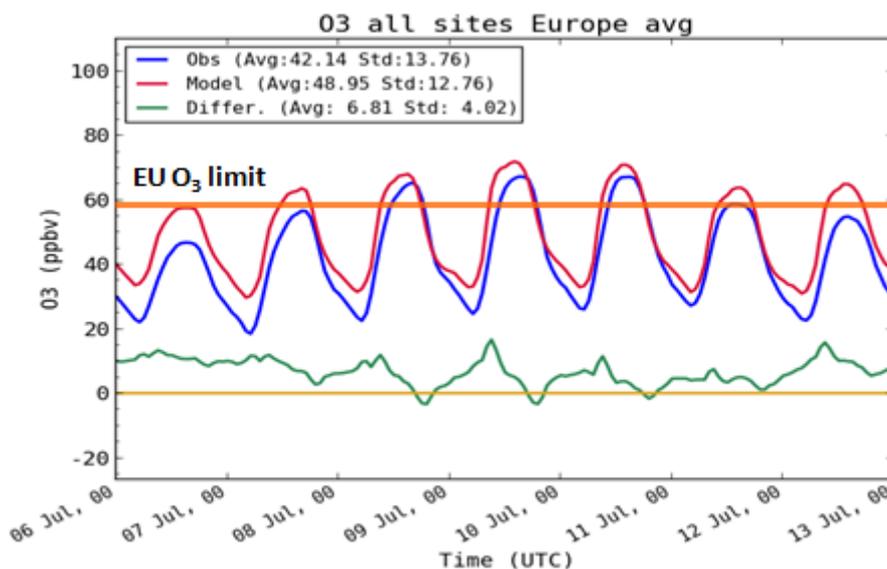


Figure 49 : Série temporelle de la concentration moyenne d’ozone mesurée par des stations au sol en Europe du 6 au 13 juillet 2010

La figure 49 présente les séries temporelles de concentrations moyennes d’ozone mesurées par les stations au sol (en bleu) et simulées par le modèle MOCAGE en mode prévision (en rouge) sur le début du mois de juillet 2010. Le seuil limite européen d’exposition à l’ozone, qui est de 60 ppbv en moyenne sur 8 h, est également indiqué. Ces séries temporelles mettent bien en évidence l’importance de cet épisode de pollution marqué par trois journées consécutives de dépassement du seuil. De plus, ces fortes concentrations ont pu être mesurées sur une grande partie de l’Europe. En effet sur la figure 50 est représenté le nombre de fois où un dépassement du seuil

d’exposition a été observé par chaque station de mesure au sol durant cette période du temps. Si les stations avec les valeurs de dépassement les plus élevées se situent principalement au centre l’Europe, cette carte permet de souligner le fait que l’épisode de pollution a touché une grande partie de l’Europe. C’est donc un choix judicieux de période pour effectuer les simulations d’observations d’ozone par satellite.

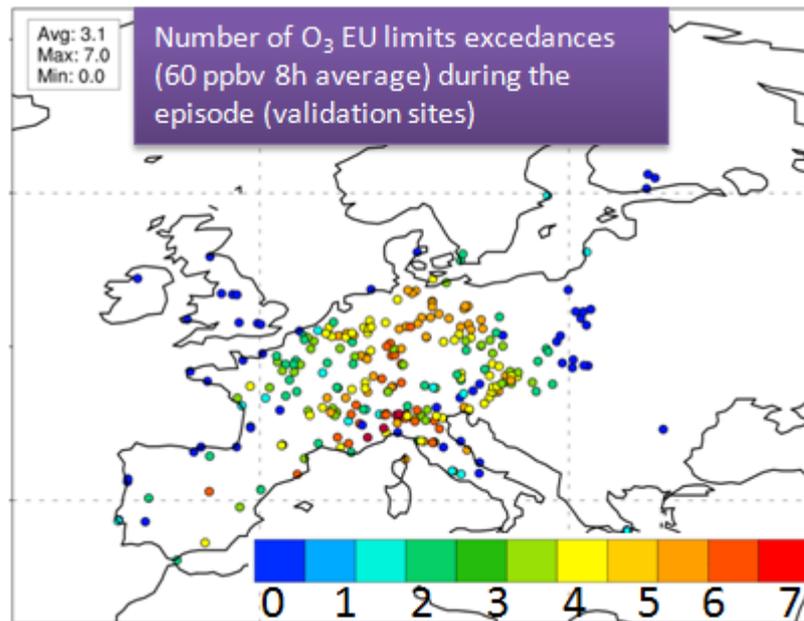


Figure 50 : Carte de l’Europe indiquant le nombre de dépassement du seuil d’exposition à l’ozone fixée par l’UE pour chaque station de mesure entre le 6 et le 13 juillet 2010

4 Simulation des performances des couplages des mesures IASI et GOME-2

Premièrement, nous analysons les performances des restitutions multispectrales utilisant des mesures des capteurs déjà en orbite IASI et GOME-2, c’est à dire : IASI seul, IASI+GOME2 et IASI+GOME3. Par la suite, nous étudions leurs performances pour restituer le profil vertical d’ozone troposphérique (section 4.1), pour observer la répartition horizontale des panaches d’ozone lors de l’épisode de pollution européen de Juillet 2010 (section 4.2), la variabilité temporelle sur plusieurs jours (section 4.3) et finalement l’influence de l’albédo de surface sur l’estimation des performances (section 4.4).

4.1 Sensibilité à l’ozone sur la troposphère

Avant d’étudier l’épisode de pollution, une analyse des AVKs obtenus pour chaque combinaison de bandes spectrales pour deux pixels typiques a été effectuée. La figure 51 présente donc les AVKs de la colonne atmosphérique 0-12 km pour les 3 configurations de bandes spectrales, TIR seul, le couplage TIR+UV et le couplage à trois bandes TIR+UV+VIS, le tout pour le cas d’un pixel au-dessus de la terre et pour le cas d’un pixel au-dessus de la mer. Comme défini dans le chapitre 3, les AVKs, ou noyaux moyens, permettent d’obtenir une information sur la sensibilité de l’inversion pour chaque point

de mesure et donc pour chaque altitude. Comme cette étude se focalise sur la détection de l’ozone troposphérique, on s’intéresse ici aux valeurs d’AVKs proches de la surface et notamment à la valeur d’AVK maximale donc au maximum de sensibilité au niveau de la surface et à son altitude. Ainsi, pour le cas du pixel au-dessus de la terre, on peut observer que le maximum de sensibilité pour les niveaux les plus bas, s’il garde une valeur semblable quelque soit la combinaison de bandes spectrales, a une altitude qui diminue avec l’ajout de bandes spectrales. En effet, ce maximum est situé entre 3 et 4 km d’altitude pour le cas TIR seul, puis se trouve autour de 3 km pour le couplage TIR+UV et se rapproche de la surface sous les 2 km d’altitude pour le couplage à 3 bandes spectrales TIR+UV+VIS. Cette amélioration est d’autant plus marquée pour le cas du pixel au-dessus de la mer puisque le maximum de sensibilité se situe autour de 5 km d’altitude pour le TIR seul, il descend autour des 4 km d’altitude pour le couplage UV+TIR et se situe entre 1 et 2 km d’altitude pour le couplage à 3 bandes spectrales.

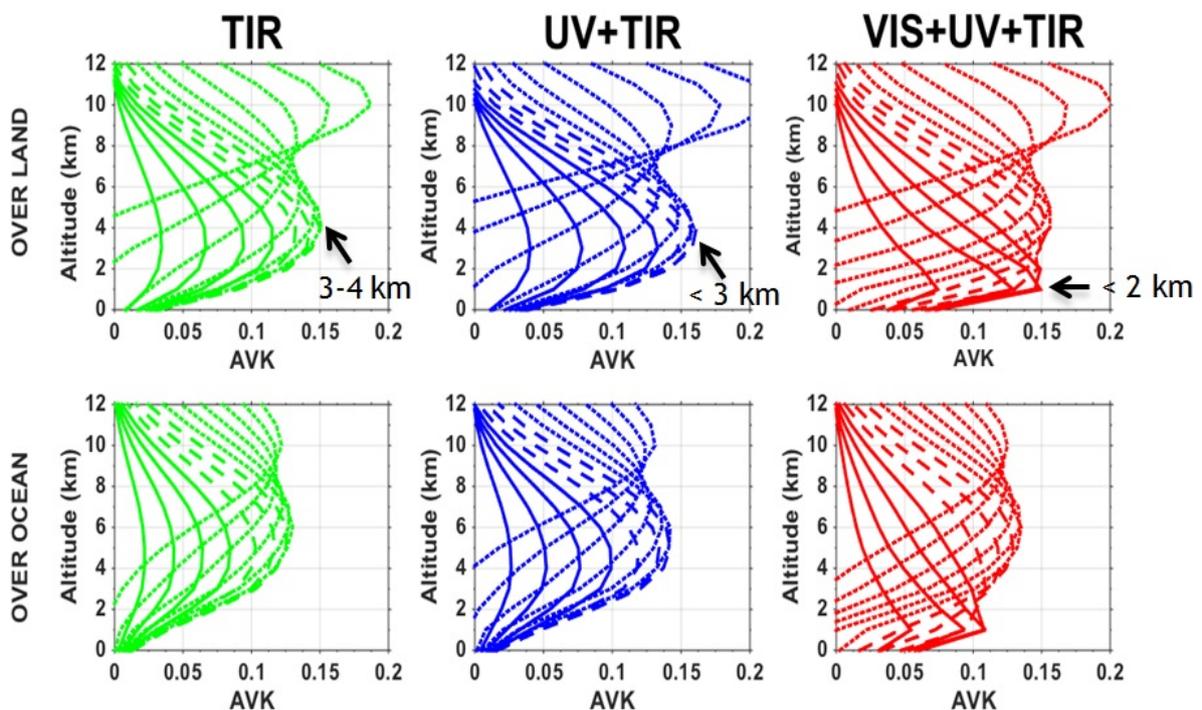


Figure 51 : AVKs pour les configurations TIR seul, UV+TIR et VIS+UV+TIR au dessus de la terre et de la mer

La variabilité spatiale de la sensibilité des trois restitutions (TIR, TIR+UV et TIR+UV+VIS) pour la colonne verticale entre la surface et 3 km d’altitude (la très basse troposphère) a été aussi analysée. Des comparaisons des DOFs et Hmax en dessous de 3 km ont été effectués. Ici, seuls les résultats pour cette altitude seront présentés. En effet, l’intérêt de cette étude étant la détection de l’ozone troposphérique, donc de l’ozone proche de la surface, il est ainsi plus pertinent de faire ses observations à ces altitudes.

La figure 52 représente les DOFs, ou degrés de liberté, pour les 3 premiers kilomètres de l’atmosphère, ainsi que les moyennes sur terre et sur mer pour chaque combinaison de bandes spectrales pour la journée du 8 juillet 2010. Les pixels blancs correspondent à

des situations où la couverture nuageuse est trop importante (supérieure à 0,3) pour pouvoir obtenir une mesure satellite exploitable ou bien à des valeurs de T_s non adéquates. Ainsi pour le cas TIR+UV+VIS, on peut remarquer une augmentation significative des DOFs nettement visible sur la carte mais également sur les valeurs moyennes puisqu'elle augmente de plus de 30% sur terre et plus de 40% sur mer par rapport au couplage TIR+UV et de plus du double sur terre et sur mer par rapport à la configuration TIR seul.

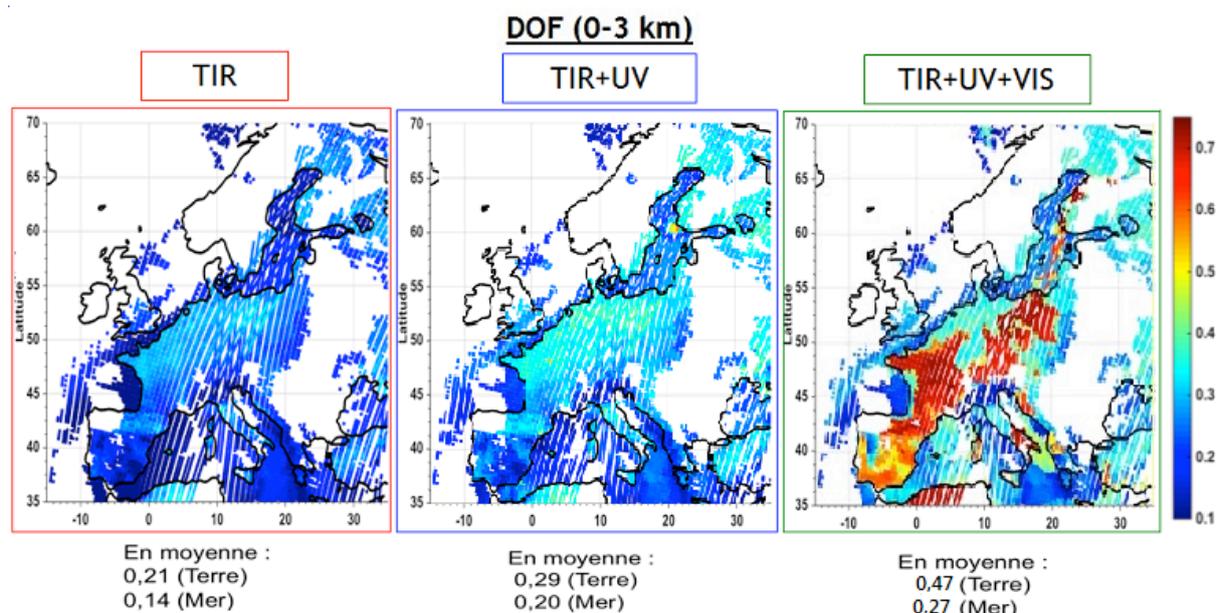


Figure 52 : Comparaison des observations simulées pour les cas TIR, TIR+UV et TIR+UV+VIS - DOF (0-3 km) 8 Juillet 2010

Les histogrammes des DOFs pour l'ensemble des pixels dont la mesure satellite est exploitable pour les trois combinaisons de bandes spectrales sont montrés sur la figure 53. Ils confirment que l'ajout du VIS au couplage multisppectral permet non seulement d'obtenir des valeurs de DOFs plus élevées, avec ici un maximum à 0,6 contre 0,35 pour les couplages TIR+UV et TIR, mais de plus cela permet d'augmenter significativement la valeur des DOFs de l'ensemble des pixels. La valeur moyenne de DOFs pour le couplage TIR+UV+VIS est d'ailleurs deux fois supérieures à celle des deux autres couplages (pixels sur terre et sur mer confondus).

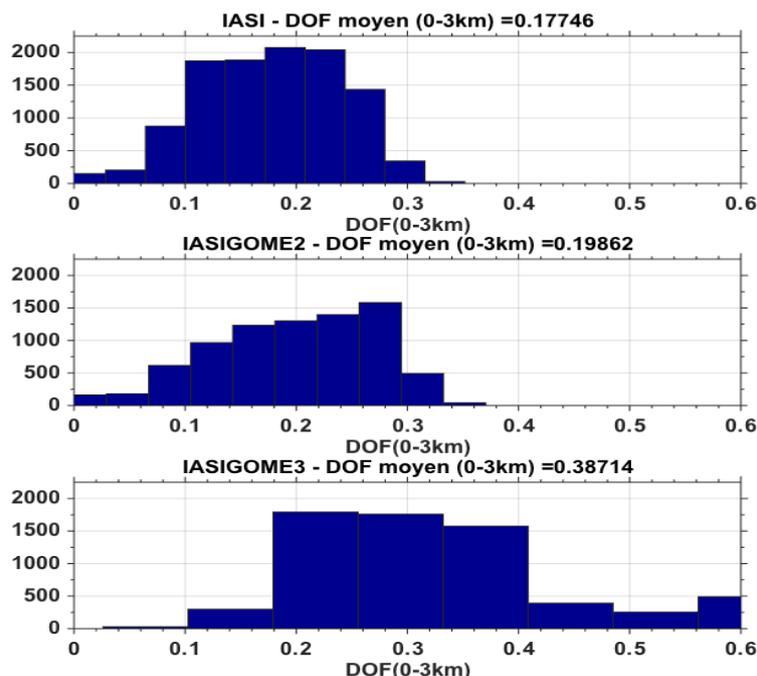


Figure 53 : Répartition des valeurs de DOFs de chaque pixel d’étude pour les trois combinaisons de bandes spectrales pour la journée du 8 juillet 2010

L’autre variable d’intérêt est la hauteur de sensibilité maximale (H_{max}), c’est à dire l’altitude où la sensibilité à l’O₃ est la plus importante. Elle est ici représentée pour les 3 premiers kilomètres de l’atmosphère, les moyennes sur terre et sur mer pour chaque combinaison de bandes spectrales étant également renseignées (figure 54). Pour le cas à trois bandes spectrales, la hauteur de sensibilité maximale diminue de près de moitié en moyenne sur terre et sur mer par rapport au cas TIR seul, et diminue en moyenne de 700 m au dessus de la terre et de 1,1 km au dessus de la mer par rapport au couplage TIR+UV. De plus, le contraste entre les pixels au dessus de la terre et ceux aussi dessus de la mer, qui est déjà nettement moins marqué en ajoutant la bande UV à la bande TIR, est encore plus atténué avec le couplage à trois bandes spectrales. Ainsi, avec l’ajout du visible on peut espérer observer des panaches d’O₃ troposphériques très proches de la surface (sous les 2 km).

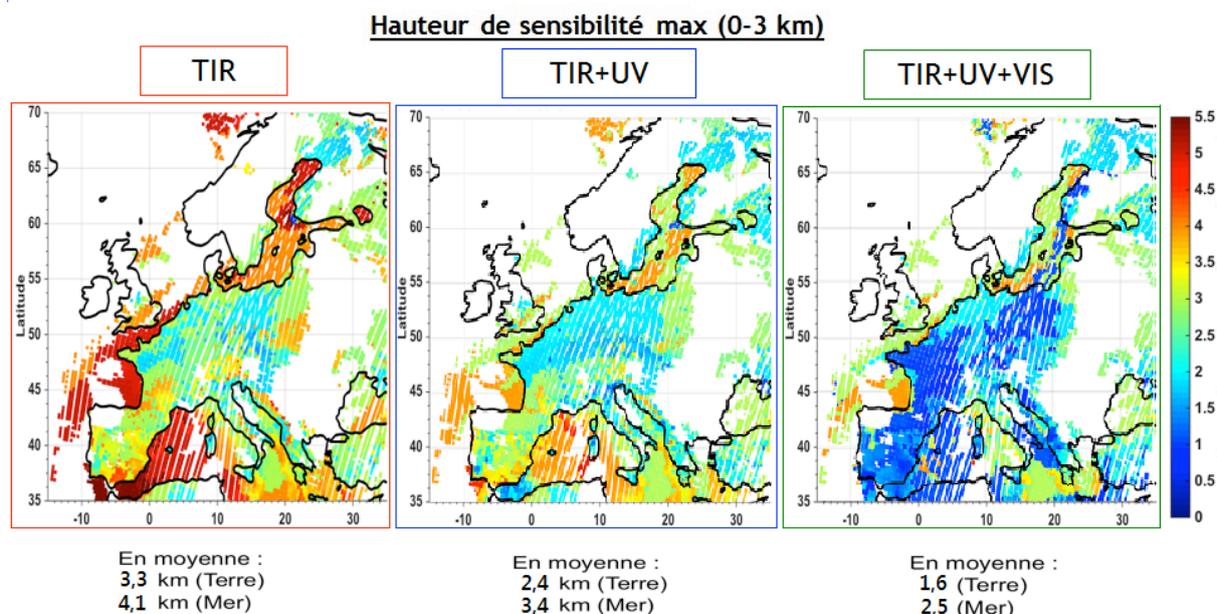


Figure 54 : Comparaison des observations simulées pour les cas TIR, TIR+UV et TIR+UV+VIS – Hauteur de sensibilité (0-3 km) 08/07/2010

Analysons ensuite les histogrammes des valeurs de H_{max} pour chaque couplage (figure 55). Tout d'abord, on s'aperçoit que pour les cas TIR seul et TIR+UV les valeurs de H_{max} s'étendent de 1 à 6 km d'altitude alors qu'elles varient entre 0,5 et 4 km d'altitude pour le couplage à 3 bandes. Cette différence est d'ailleurs visible dans les valeurs moyennes de H_{max} . En effet, la moyenne qui est à 3,7 km pour le cas IASI et de 3,4 km et le cas IASI+GOME2 descend à 2 km avec l'ajout de la bande de Chappuis. Enfin, on observe sur le graphique de IASI+GOME3 que H_{max} pour près de la moitié des mesures est égale ou inférieure à 2 km. La comparaison avec la figure 54 permet de relever que la majorité des valeurs de H_{max} égales ou supérieures à 3 km correspondent en fait à des pixels situés au dessus de la mer.

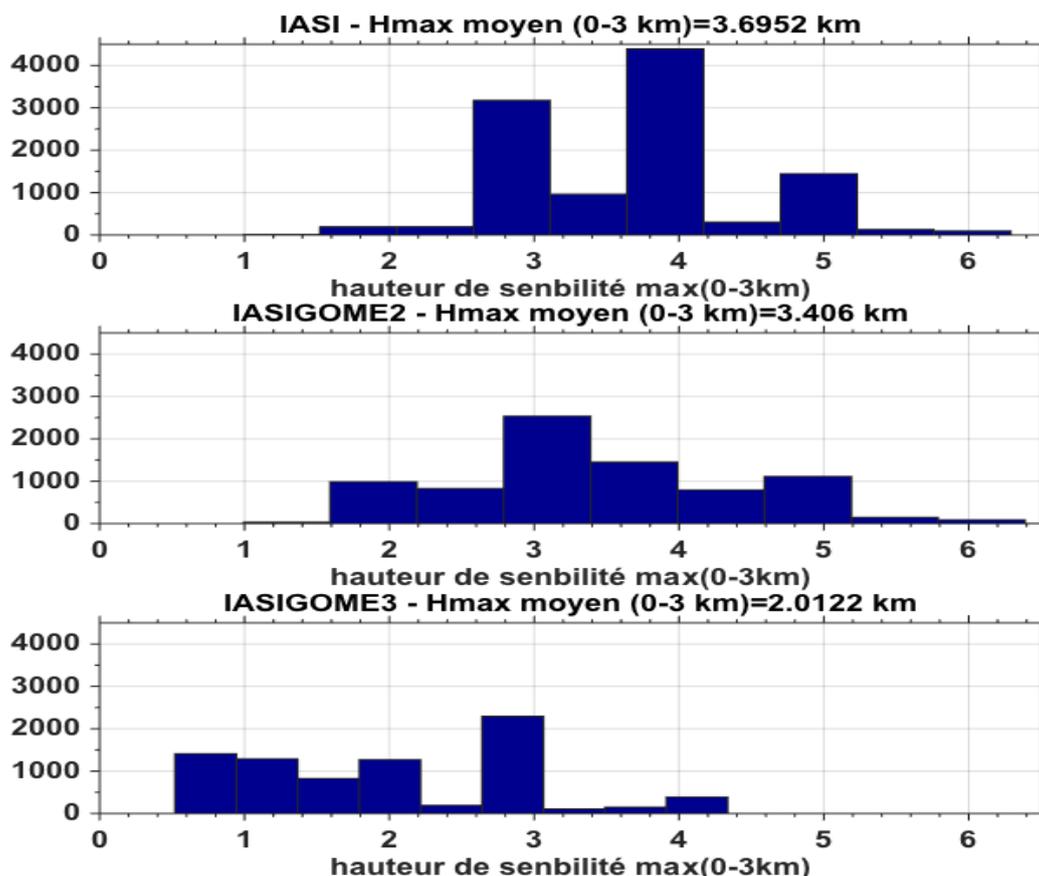


Figure 55 : Répartition des valeurs de H_{max} de chaque pixel d’étude pour les trois combinaisons de bandes spectrales pour la journée du 8 juillet 2010

4.2 Restitution de la répartition horizontale de l’ozone dans la très basse troposphère

Les cartes de concentrations d’O₃ obtenues à l’aide des 3 combinaisons de bandes spectrales (pseudo-observations) ainsi que celle fournie par le modèle MOCAGE (pseudo-réalité) sont présentées dans la figure 56. Ainsi, la combinaison à 3 bandes TIR+UV+VIS, permet d’observer non seulement les mêmes panaches que les deux autres combinaisons de bandes spectrales avec toutefois des concentrations plus importantes, mais il permet également d’apercevoir d’autres panaches non visibles auparavant. En effet, avec les couplages TIR seul et TIR+UV, on observe au dessus de la France un panache qui s’étire du nord au sud de la côte Atlantique, et qui s’étend jusqu’à la région parisienne. Avec l’ajout du VIS au couplage multispectral, on observe également ce panache au dessus de ces zones, avec des concentrations plus élevées, mais on peut observer qu’il continue de s’étendre jusqu’au sud-est de la France, tout comme sur la pseudo-réalité. Cette différence s’explique par l’augmentation des DOFs avec l’ajout du VIS, donc de la sensibilité à l’O₃, et aussi la diminution de hauteur de sensibilité associée permettant donc d’observer l’ozone plus proche de la surface. Ainsi, ce panache qui s’étend vers le sud-est de la France est visible uniquement avec le couplage à 3 bandes spectrales car il est probablement situé sous les 2 km d’altitude et semble donc être sous

la limite de détection des couplages TIR seul et TIR+UV (ce type d’analyse sera approfondi par la suite).

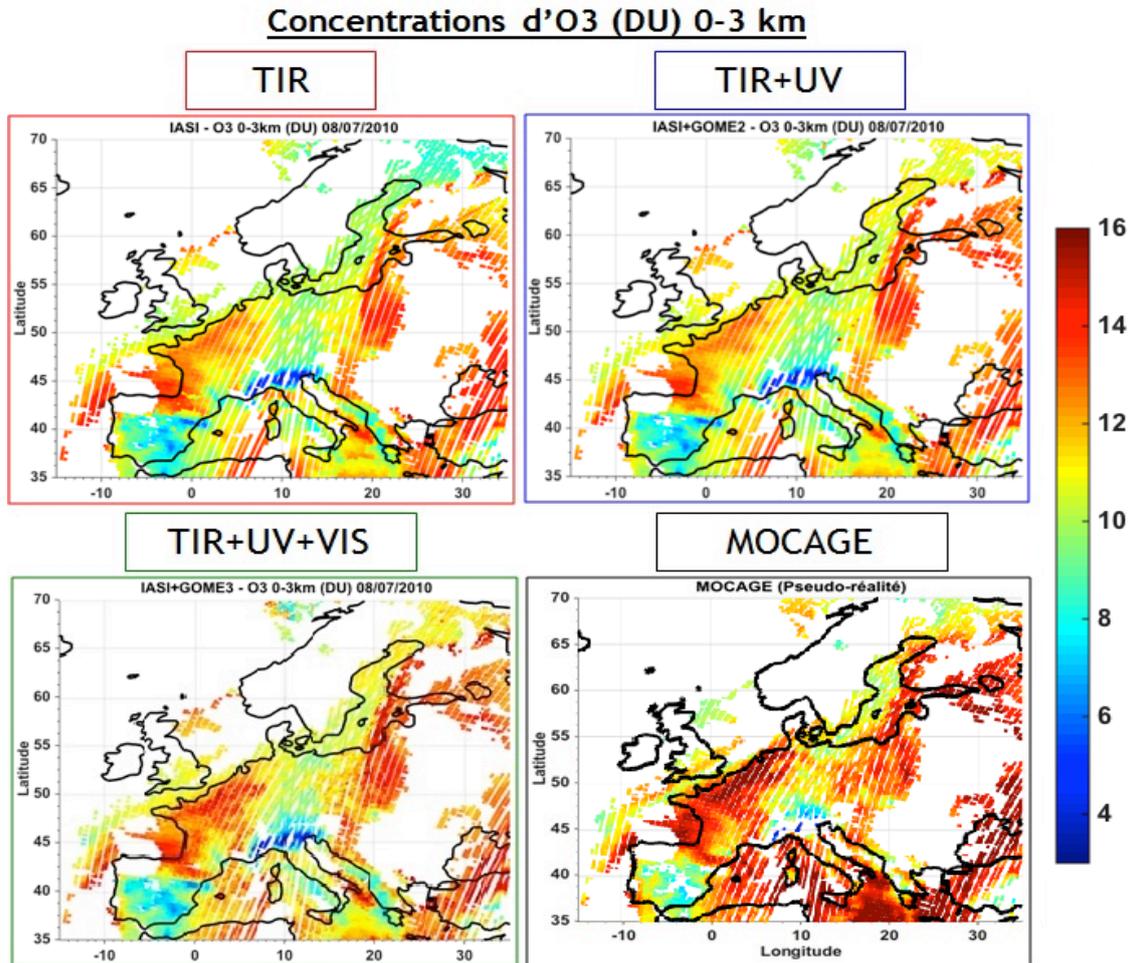


Figure 56 : Comparaison des observations simulées pour les cas TIR, TIR+UV et TIR+UV+VIS et de la pseudo-réalité de MOCAGE – C₀₃ (0-3 km) 08/07/2010

4.3 Evolution temporelle des performances de la restitution multispectrale de l’ozone dans la très basse troposphère

L’évolution sur les trois jours restants de l’épisode de pollution sera étudiée par la suite. La figure 57 présente des cartes de DOFs entre la surface et 3 km d’altitude pour les trois couplages sur les journées du 9, 10 et 11 juillet 2010. Comme pour la journée du 8 juillet, l’observation de ces cartes permet de mettre en évidence une augmentation significative des valeurs de DOF pour le couplage à trois bandes spectrales, principalement pour les pixels situés au dessus de la terre. En effet, pour certains pixels, la valeur des DOFs est presque doublée, en passant d’une valeur proche de 0,4 à une valeur autour de 0,7. De plus, ces augmentations sont localisées en grande partie dans les mêmes zones pour les trois journées (Afrique du Nord, sud de l’Italie, péninsule ibérique et centre de l’Europe).

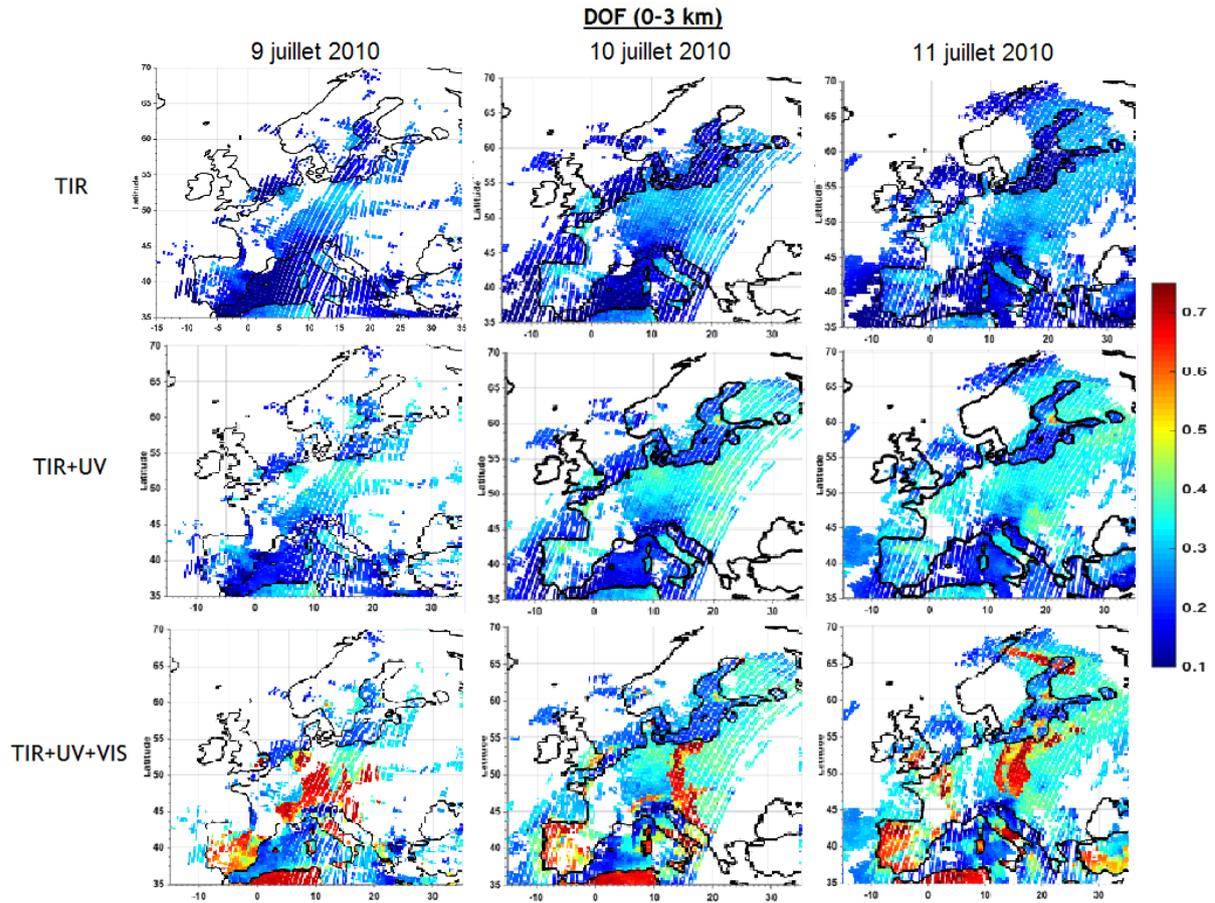


Figure 57 : Comparaison des observations simulées pour les cas TIR, TIR+UV et TIR+UV+VIS – DOFs entre la surface et 3 km d’altitude du 9 au 11 Juillet 2010

Une conclusion similaire peut être faite en observant la figure 58 représentant les valeurs de H_{\max} (0-3 km) pour les trois couplages. En effet, tout comme pour la journée du 8 juillet, l’observation de ses cartes met en évidence la diminution importante de la hauteur de sensibilité maximale dans un premier temps avec l’ajout de la bande UV, puis de nouveau à l’ajout du VIS. Le couplage à 3 bandes spectrales permet ainsi d’obtenir des valeurs de H_{\max} plus faibles mais diminue également encore plus le contraste entre les pixels sur terre et ceux sur mer. Enfin, la comparaison des cartes du couplage à 3 bandes pour les 3 journées permet de remarquer de nouveau que les valeurs les plus faibles de H_{\max} , et donc les diminutions les plus importantes, sont localisées au niveau des mêmes zones que celles citées précédemment.

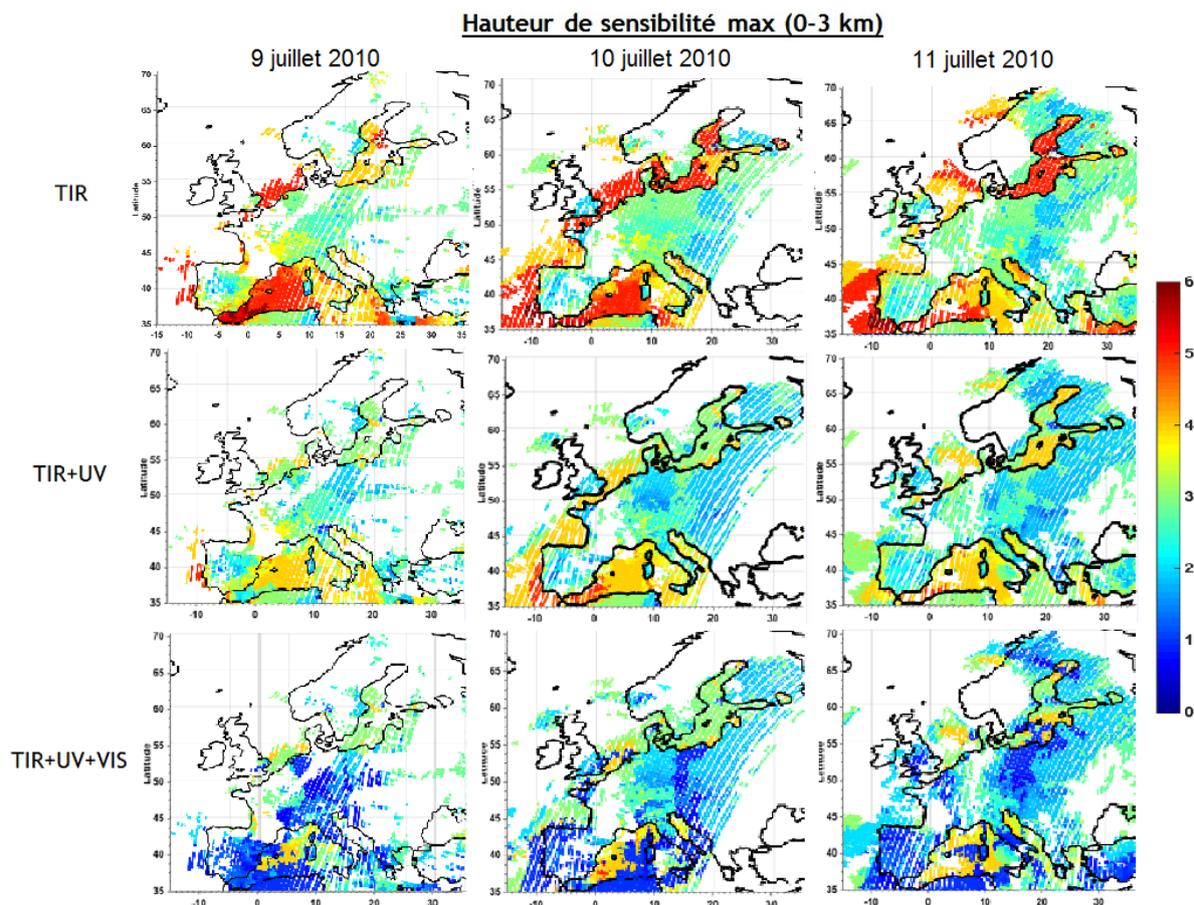


Figure 58 : Hauteurs de sensibilité entre la surface et 3 km d’altitude des observations simulées pour les cas TIR, TIR+UV et TIR+UV+VIS, pour 9 au 11 juillet 2010

La pseudo-réalité MOCAGE montre les localisations des panaches d’ozone entre le 9 et 11 juillet 2010 (Figure 59 en bas). Le 9 juillet, les panaches avec des concentrations d’ozone les plus élevées se trouvent en Afrique de Nord, sur la Méditerranée, au sud-est de la France, en région parisienne et au nord de l’Allemagne. Lorsque l’on compare les observations pour les trois couplages, on remarque que les panaches en Méditerranée et en France et en Allemagne sont observés par les 3 couplages mais que seul IASI+GOME3 permet d’obtenir des concentrations nettement plus élevées que sur les autres observations satellitaires. Ces concentrations sont plus proches de celles de la pseudo-réalité. On peut aussi noter que ces panaches avec des concentrations d’ozone élevées observés par IASI+GOME3 sont localisés sur des zones géographiques où les valeurs de DOFs sont les plus importantes et celles de H_{max} les plus faibles (voir figures 57 et 58).

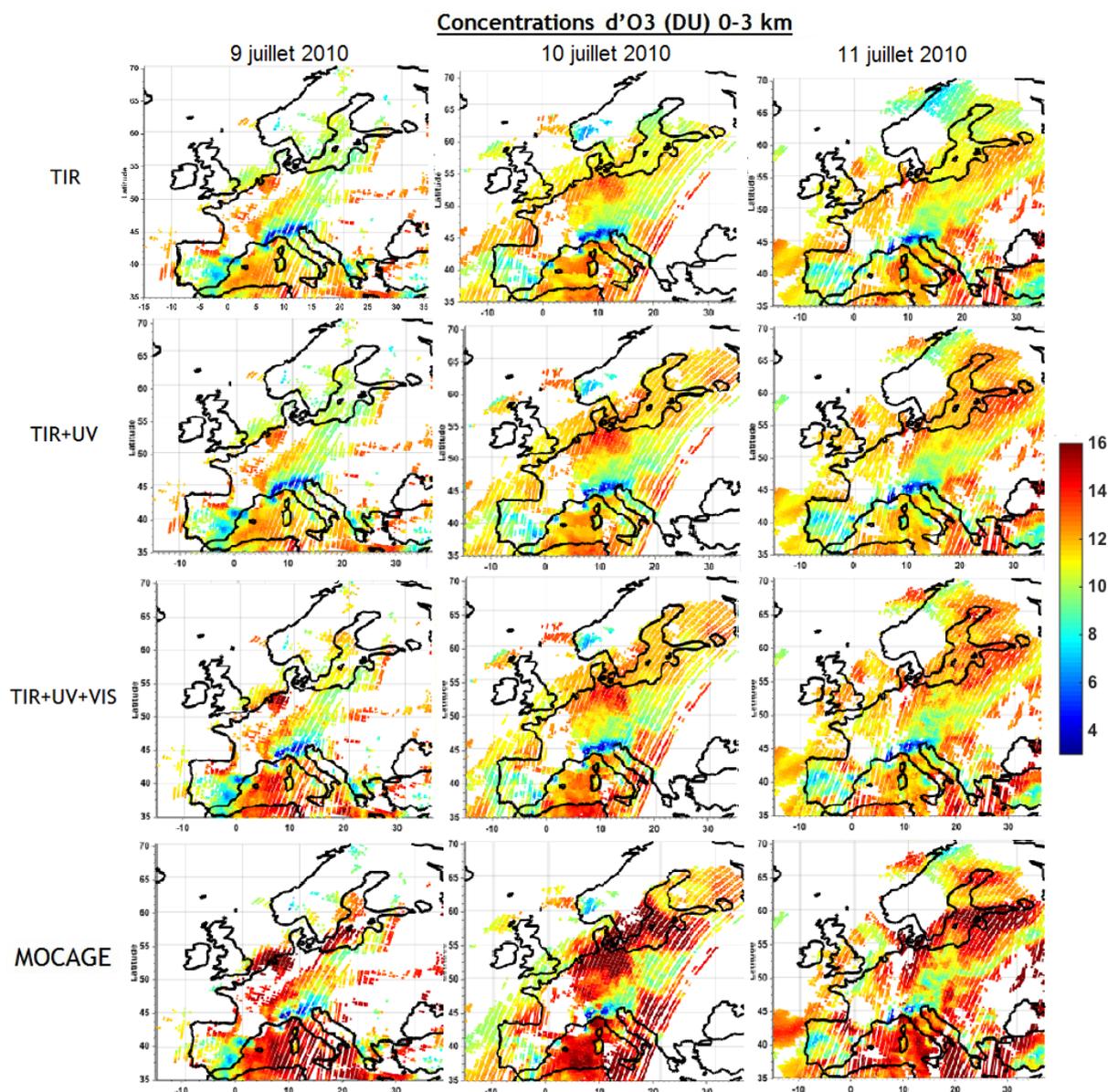


Figure 59 : Concentrations d’ozone entre la surface et 3 km d’altitude observées par les approches simulées TIR, TIR+UV et TIR+UV+VIS et de la pseudo-réalité de MOCAGE, pour le 9 au 11 Juillet 2010

Pour le 10 juillet, les panaches ont commencé à se déplacer vers le nord-ouest de l’Europe. Ainsi, un des panaches s’étend maintenant de l’Allemagne jusqu’au nord de la Finlande, et le deuxième se trouve sur la Méditerranée et l’Italie. Les trois pseudo-observations montrent des panaches similaires en Afrique du Nord et en Méditerranée ou encore au nord de l’Allemagne et de la Pologne, avec toutefois des concentrations plus élevées pour IASI+GOME3.

Enfin, le 11 juillet des conclusions similaires à celles des autres journées sont obtenues. Les panaches d’ozone situés au nord-est de l’Europe, au Danemark ou encore en Méditerranée sont observés par IASI+GOME3 avec des concentrations plus élevées.

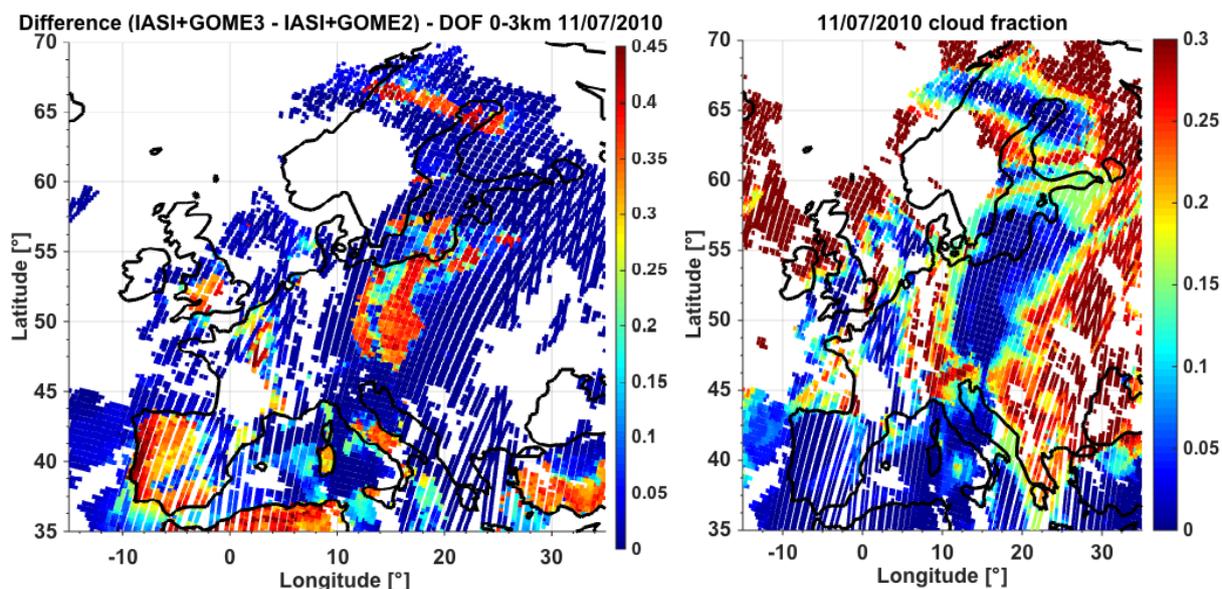


Figure 60 : Différence de DOF entre les configurations IASIGOME 3 et IASI+GOME-2 (gauche) et couverture nuageuse obtenue à partir des mesures de GOME-2 (droite) pour la journée du 11 juillet 2010

Les figures 56 et 59, qui représentent donc les concentrations d’ozone observées par les 3 configurations de longueurs d’onde, mettent en avant que l’ajout de la bande du VIS au couplage TIR+UV permet d’observer des concentrations d’ozone plus importantes. Puis, en comparant ces cartes avec les cartes de concentrations d’ozone du modèle MOCAGE, donc avec les pseudo-observations, on peut remarquer que l’augmentation des concentrations observées avec l’ajout du VIS semble être localisée non pas sur l’ensemble du domaine d’étude mais uniquement au niveau de zones spécifiques. Après quelques recherches, j’ai ainsi remarqué que ce phénomène était étroitement lié avec la couverture nuageuse. La figure 60 représente donc la différence de DOF entre les configurations IASIGOME 3 et IASI+GOME-2 ainsi que la couverture nuageuse pour la journée du 11 juillet 2010. Ces cartes mettent en évidence que les zones où les valeurs de DOFs sont les plus importantes (Portugal et Ouest de l’Espagne, Nord de l’Afrique, Sud de la Turquie, Sud Ouest de l’Angleterre ou encore centre de l’Europe) correspondent à des zones de ciel clair, sur terre uniquement. Ainsi, l’apport amené par l’ajout de la bande VIS au couplage TIR+UV pour l’observation de l’O₃ troposphérique semble être fortement dépendant de la couverture nuageuse.

Une analyse de la répartition verticale des panaches d’ozone analysés précédemment dans la très basse troposphère est montrée dans les figures 61 et 62. Ces figures présentes des transects longitudinaux des profils verticaux d’ozone dans la troposphère (entre la surface et 9 km). Le premier exemple analyse les trois couplages spectraux et le modèle MOCAGE à 51°N le 10 juillet (figure 61). Ce transect montre le panache d’ozone sur l’Allemagne. On peut souligner une amélioration du couplage UV+TIR par rapport au TIR seul et aussi la valeur ajoutée par l’inclusion de la bande VIS. Le couplage TIR+UV+VIS permet l’observation de concentrations d’O₃ plus élevées et notamment sous les 2 km d’altitude. Cela est bien mis en valeur avec le panache situé entre 10 et 15° de longitude, panache qui est d’ailleurs également nettement visible sur les cartes précédentes (figure 59).

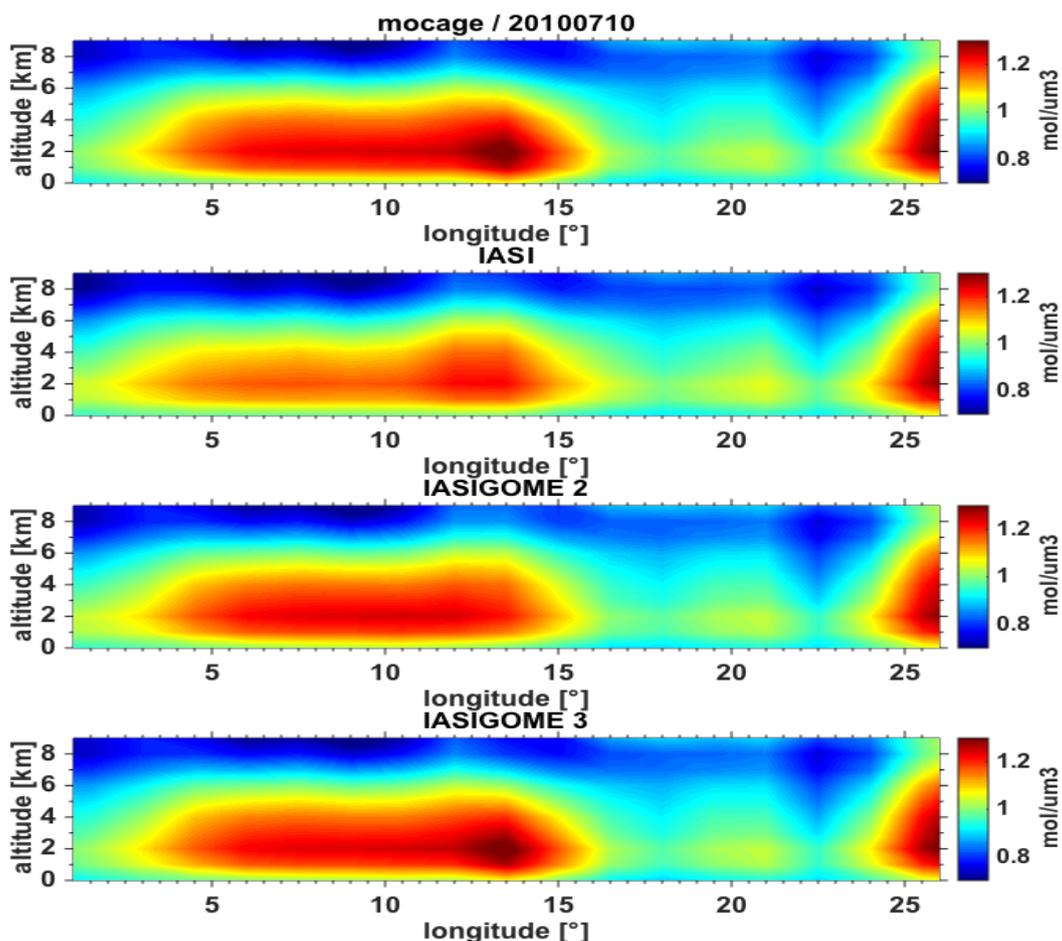


Figure 61 : Transects longitudinaux des profils verticaux d’ozone entre la surface et 8 km d’altitude à 51°N pour MOCAGE et les couplages IASI, IASI+GOME2 et IASI+GOME3, le 10 juillet 2010

Un transect au 56°N le 11 juillet montre l’étendu vertical du panaches d’ozone sur le Danemark (figure 62). On remarque la capacité du couplage à trois bandes à observer des panaches d’ozone situé sous les 2 km d’altitude en concentration plus élevée.

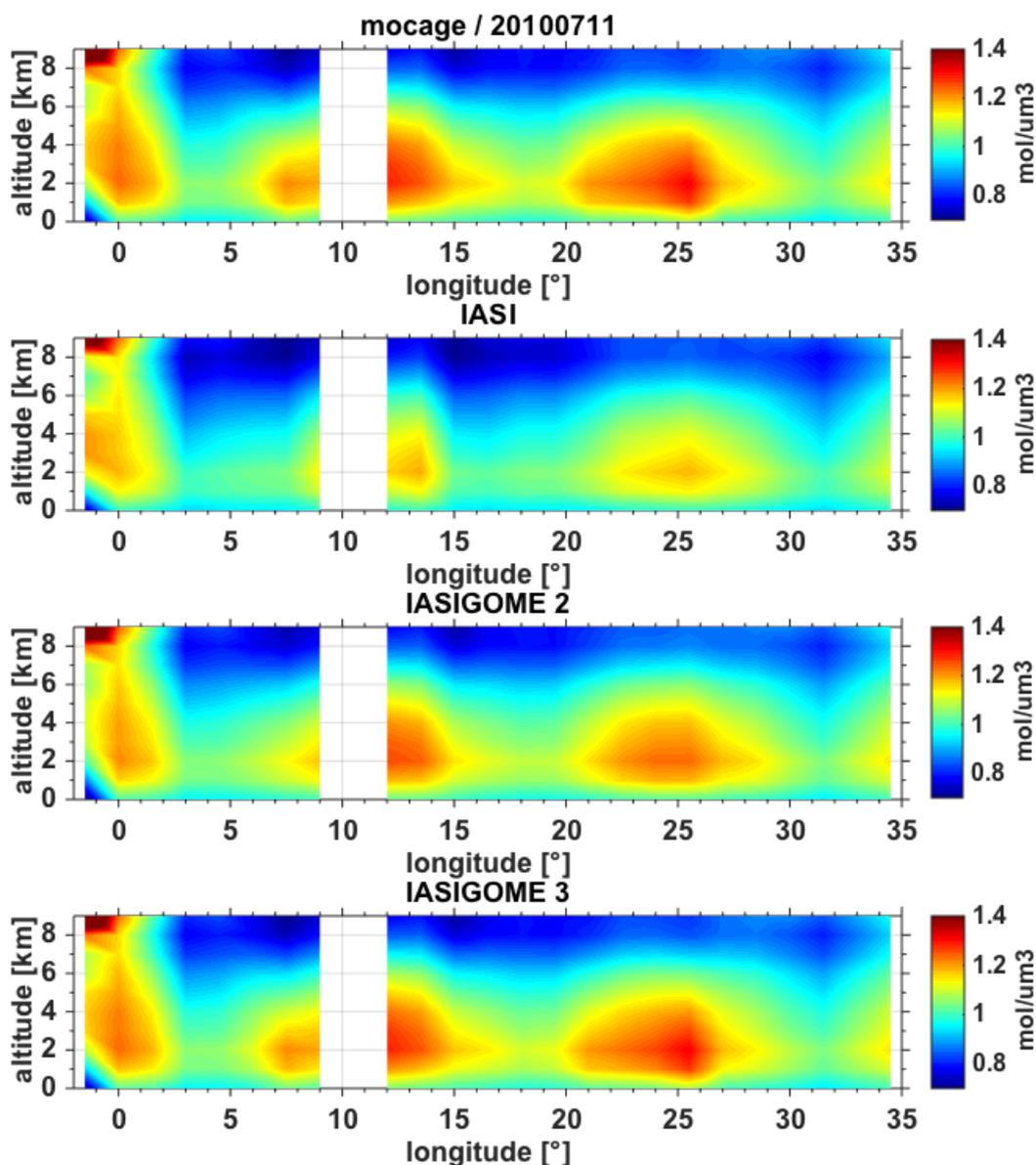


Figure 62 : Coupes transversales entre la surface et 8 km d’altitude à 56° de latitude Nord pour MOCAGE et les couplages IASI, IASIGOME 2 et IASIGOME 3 sur la journée du 11 juillet 2010

4.4 Sensibilité à l’albédo de surface

L’albédo de surface est un élément clé pour la simulation adéquate des spectres dans la bande VIS mais aussi sa valeur modifie l’estimation de la sensibilité de la restitution. Pour estimer l’impact de la valeur de l’albédo de surface sur l’estimation de la sensibilité, une analyse comparative est présentée dans les figures 63, 64 et 65, pour respectivement DOFs, H_{\max} et concentrations d’ozone. Deux bases de données de l’albédo de surface ont été testé : une issues de mesures d’OMI à 4 longueurs d’ondes et interpolé pour les restes et une autres à haute résolution spectrale estimée avec des mesures de MODIS (voir la section 2.3 du chapitre 3 pour plus de détails). Le simulateur d’observation a été mis en œuvre avec ces deux configurations pour le 8 juillet 2010.

La figure 63 représente les DOFs entre la surface et 3 km d’altitude pour la journée du 8 juillet 2010 obtenus pour le cas TIR+UV+VIS avec les deux bases de données d’albédo de surface, ainsi qu’une carte correspondant à la différence entre ces deux configurations (Différence sous la forme « $DOF_{MODIS} - DOF_{OMI}$ »). Les valeurs moyennes de DOFs sur terre et sur mer pour chacune des configurations sont également indiquées. On peut ainsi observer au travers de ses moyennes une légère augmentation des DOFs sur terre, (+0,3 en moyenne), et une baisse plus marquée sur mer (-0,8 en moyenne) notamment au dessus de la Méditerranée. Cette différence est également nettement visible sur la carte représentant les différences entre les deux configurations avec une différence positive d’une part, c’est-à-dire une augmentation des DOFs avec le nouvel albédo, au niveau du continent et une différence négative, donc une diminution des DOFs, dans le bassin méditerranéen.

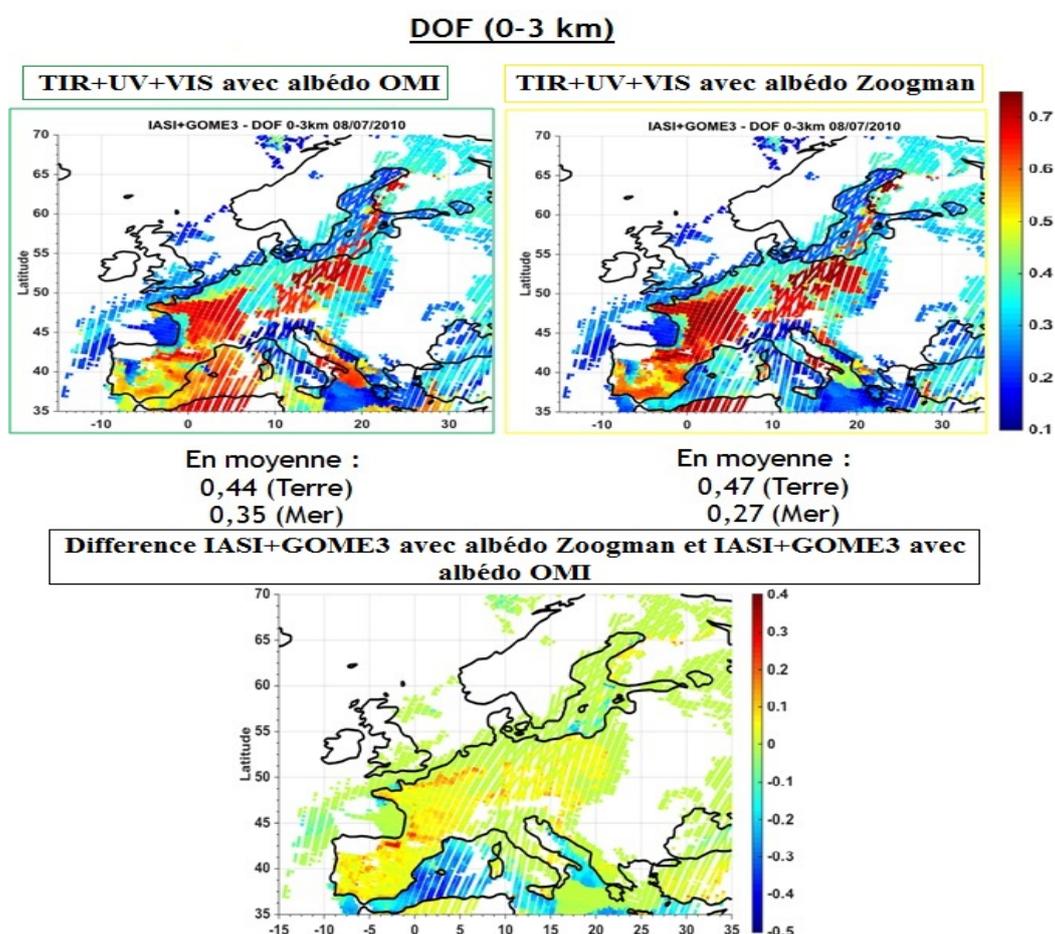


Figure 63 : Comparaison IASI+GOME3 sans et avec la nouvelle base de données d’albédo de surface – DOF (0-3 km) le 8 juillet 2010

Les différences pour la hauteur de sensibilité maximale H_{max} avec les bases de données d’albédo de surface de MODIS et OMI sont moins visibles (Figure 64). Les légères différences semblent montrer une diminution de la hauteur de sensibilité maximale pour certains pixels situés au dessus du continent et une augmentation pour quelques pixels marins avec la base de données MODIS par rapport à celle issue d’OMI. Cette légère différence est également visible sur les valeurs moyennes de H_{max} puisque l’on

note une diminution de 0,1 km pour les pixels terrestres et une augmentation de 0,2 km pour les pixels marins.

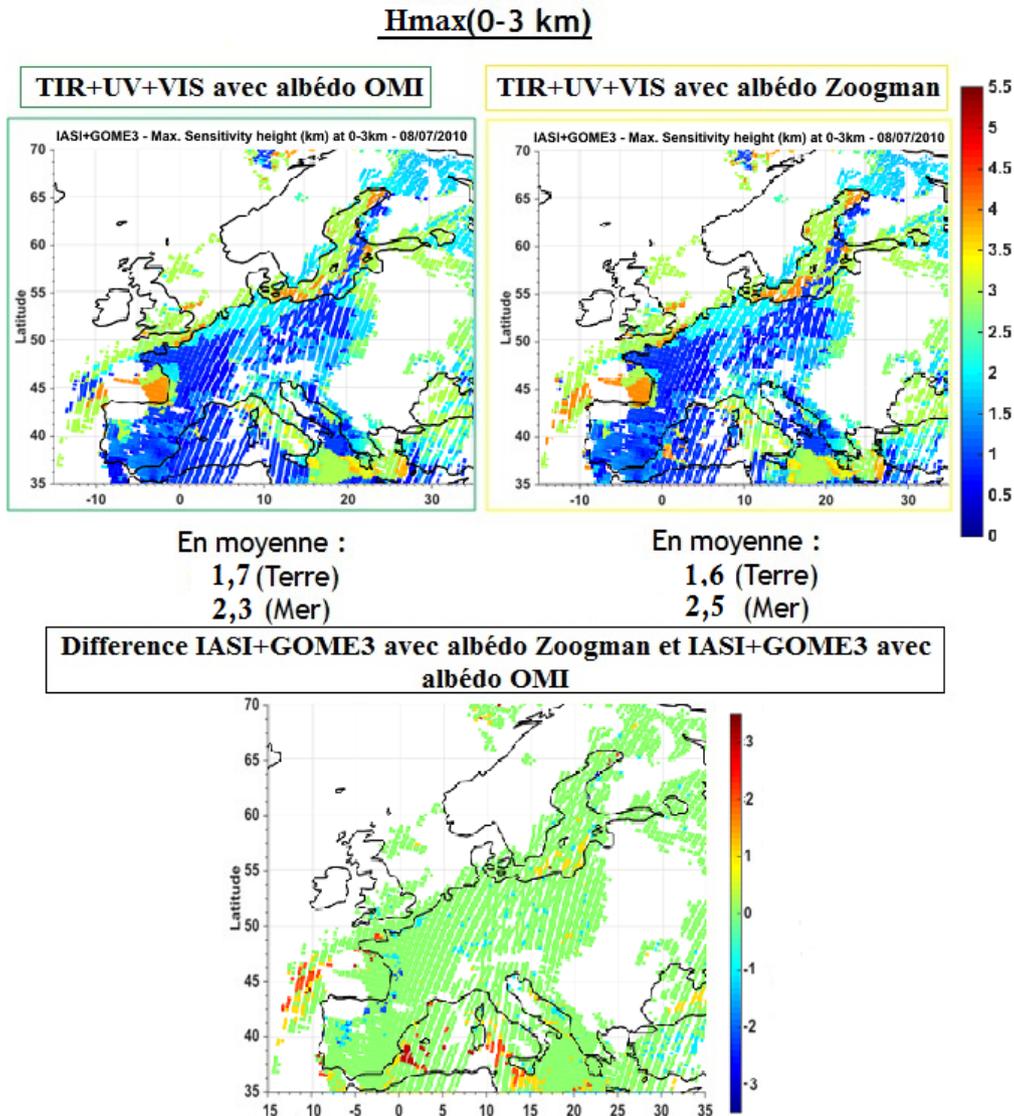


Figure 64 : Comparaison IASI+GOME3 sans et avec la nouvelle base de données d'albédo de surface – Hmax (0-3 km) le 8 juillet 2010

L'impact des valeurs d'albédo de surface sur les concentrations observées avec les trois approches satellitaires est montré sur la figure 65. Comme pour les DOFs et H_{max} , on remarque une augmentation des performances sur terre avec des concentrations d' O_3 plus élevées avec les données d'albédo de surface issues de MODIS et une diminution sur mer notamment au niveau de la Méditerranée. De plus, l'utilisation d'un albédo de surface MODIS permet d'obtenir des panaches d' O_3 avec des concentrations plus homogènes sur terre, comme le montre le panache situé au dessus de la France.

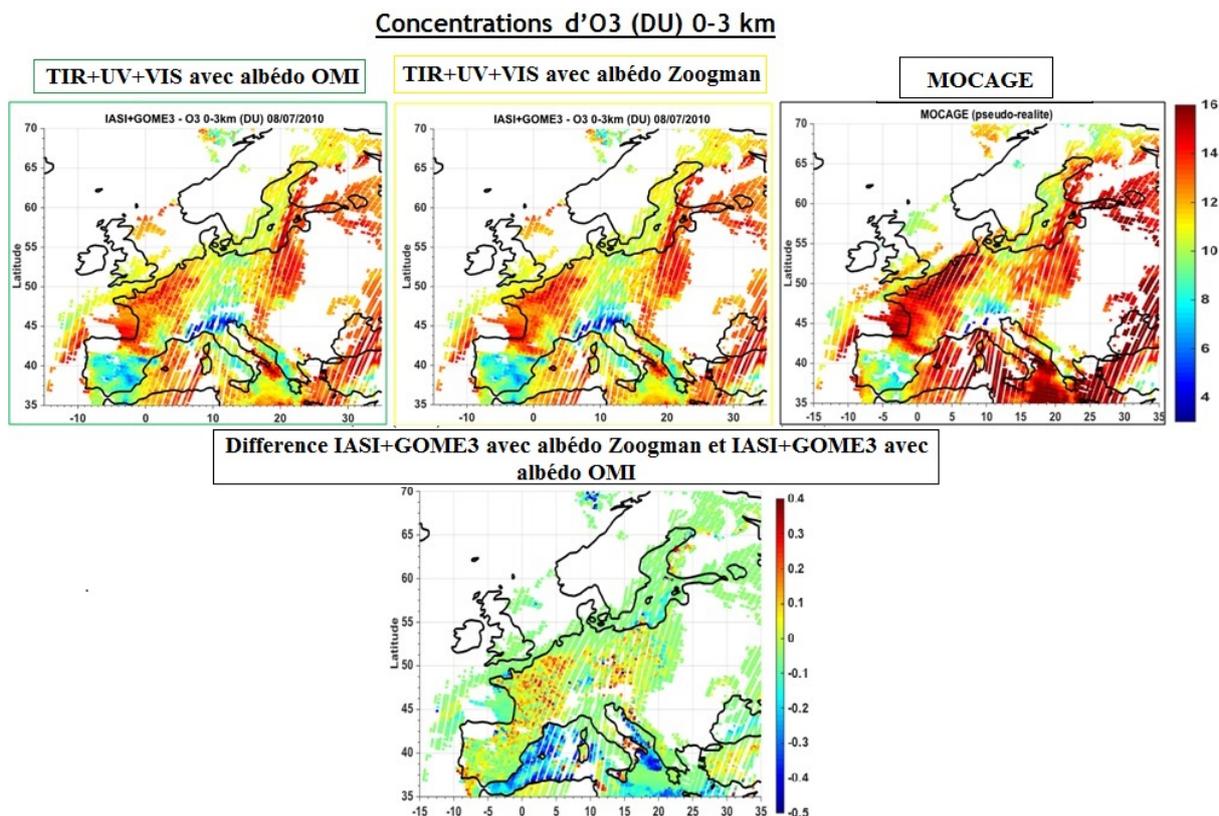


Figure 65 : Comparaison IASI+GOME3 sans et avec la nouvelle base de données d’albédo de surface – Concentrations d’ozone (0-3 km) 08/07/2010

5 Simulation des observations géostationnaires de l’ozone avec MAGEAQ

MAGEAQ (Monitoring the Atmosphere from Geostationary orbit for European Air Quality) est un projet de satellite géostationnaire multispectral TIR+VIS dédié à la surveillance de la qualité de l’air en Europe et notamment à la mesure de l’ozone troposphérique parmi d’autres polluants. Il a été proposé au programme Earth Explorer de l’ESA ainsi qu’au CNES avec le projet OREPO (PI. J.-L. Attié) accepté en phase 0. A l’aide du simulateur d’observations développé dans le cadre de cette thèse, une comparaison des mesures simulées de MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS avec les trois couplages des instruments IASI et GOME-2 a été effectuée pour la journée du 11 juillet 2010. Cette comparaison apporte un double intérêt, puisque cela permet d’une part de comparer les observations de IASI+GOME3 avec celles d’un autre appareil de mesure, et d’autre part de faire une nouvelle analyse de la valeur ajoutée de la bande VIS dans l’observation de l’ozone troposphérique par approche géostationnaire.

5.1 Caractéristiques instrumentales de MAGEAQ

Pour pouvoir effectuer la simulation d’observations, l’ensemble des caractéristiques instrumentales de MAGEAQ, compilées dans le tableau 8, a été renseigné dans le simulateur.

	IASI	GOME-2	MAGEAQ
Bruit radiométrique	20 nW/cm ² cm ⁻¹ sr	2 10 ⁻³ (λ=290 - 306 nm) 2 10 ⁻⁴ (λ=325 - 340 nm) 5 10 ⁻⁵ (λ=500 - 650 nm)	6,04 nW/cm ² cm ⁻¹ sr (TIR) 9,2 × 10 ⁻³ W /m ² sr nm (VIS)
Résolution spectrale	0,50 cm ⁻¹	0,22 – 0,28 nm (λ=290 - 306 nm) 0,24 – 0,30 nm (λ=325 - 650 nm)	0,2 cm ⁻¹ (TIR) (λ=1000-1070 cm-1) 1,2 nm (VIS) (λ=520-650 cm-1)
SNR (Signal to Noise Ratio)	300 à 500 λ=8 – 12 μm	32 (λ=290 - 306 nm) 350 (λ=325 - 340 nm) 700 (λ=500 - 650 nm)	1500 (TIR) 1500 à 2500 (VIS)
Résolution spatiale	Pixels de 12 km espacés de 25 km	80 x 40 km ²	15 x 15 km ²
Echantillonnage spectral	0,25 cm ⁻¹	0,12 nm	0,1 cm ⁻¹ (TIR) 0,3 nm (VIS)

Tableau 8 : Caractéristiques instrumentales de IASI, GOME-2 et MAGEAQ. Les caractéristiques de MAGEAQ considérées sont celles présentées par Hache et al., 2014

MAGEAQ est une mission conçue pour l’observation des polluants atmosphériques et donc ses performances instrumentales sont dans l’ensemble meilleures en comparaison aux missions actuelles IASI et GOME-2. Les couplages IASI+GOME2 et IASI+GOME3 utilisent la résolution spatiale de IASI, soit des pixels espacés de 25 km par rapport des pixels de 15x15 km² pour MAGEAQ. La résolution spectrale de MAGEAQ est plus de 2,5 fois plus fine que celle de IASI pour sa bande TIR et est 4 à 5 fois plus grossière que celle de GOME-2 pour la bande VIS. Enfin, MAGEAQ TIR et VIS ont un bruit radiométrique au moins trois fois plus faible que IASI et GOME-2, respectivement.

De plus, il est important de préciser que IASI et GOME-2 effectuent leurs mesures en Europe quotidiennement à environ 9h30 et 21h30, tandis que MAGEAQ, étant géostationnaire, effectue une mesure chaque heure. Pour cette étude, des mesures de MAGEAQ toutes les 2h ont été calculées entre 8h et 18h pour la journée du 11 juillet 2018. Ainsi, pour la comparaison avec les mesures de IASI et GOME-2, on choisira la mesure MAGEAQ effectuée à 10h.

5.2 Sensibilité à l’ozone sur la troposphère

Cette étude des observations simulées sur la journée du 11 juillet 2010 se sera focalisée donc à la fois sur la comparaison des performances de restitution des concentrations d’ozone des 5 couplages, mais également sur la comparaison entre MAGEAQ TIR et le couplage MAGEAQ TIR+VIS à partir de la méthode VIS développée dans cette thèse.

La figure 66 représente des exemples de noyaux moyens entre la surface et 8 km d’altitude pour le couplage IASI+GOME3 et les deux configurations de MAGEAQ, TIR seul et TIR+VIS, pour un pixel sur terre (au nord de l’Espagne) et un sur mer (sur l’Atlantique proche de la côte espagnole). Les couleurs permettent ici de différencier les hauteurs des AVKs, il y a donc les AVKs entre la surface et 4 km d’altitude (rouge) et ceux compris entre 4 et 8 km d’altitude (noir).

Sur terre, on peut remarquer que les AVKs des 3 premiers niveaux restitués (entre la surface et 2 km) des trois méthodes semblent avoir un maximum, donc un maximum de sensibilité, situé à la même altitude, à 1 km. En revanche, les valeurs des AVKs proche de la surface sont plus élevées pour MAGEAQ TIR+VIS et dans un second temps pour MAGEAQ TIR. Sur mer, les différences entre chaque couplage sont beaucoup plus marquées. En effet, on remarque que l’intensité maximale des AVK des 3 premiers kilomètres depuis la surface, est de 0,1 pour IASI+GOME3, contre 0,2 pour MAGEAQ TIR et environ 0,35 pour MAGEAQ VIS+TIR. Ces différences notables pourraient s’expliquer dans un premier temps par la différence de bruit radiométrique, beaucoup plus faible pour MAGEAQ que pour IASI et GOME-2. En effet, la mer ayant un albédo et une température de surface plus faibles que la terre, les spectres de réflectance et radiance mesurés par GOME-2, IASI et MAGEAQ ont une intensité plus faible. Or si le bruit radiométrique est important, comme pour GOME-2 et IASI, et que les spectres mesurés ont une faible intensité, l’impact relatif du bruit est plus significatif et les spectres fournissent moins d’information sur l’ozone. Dans ces cas de plus faible information sur l’ozone sur chaque mesure, les gains des couplages multispectraux tel que celui de MAGEAQ TIR+VIS, est le plus significatif.

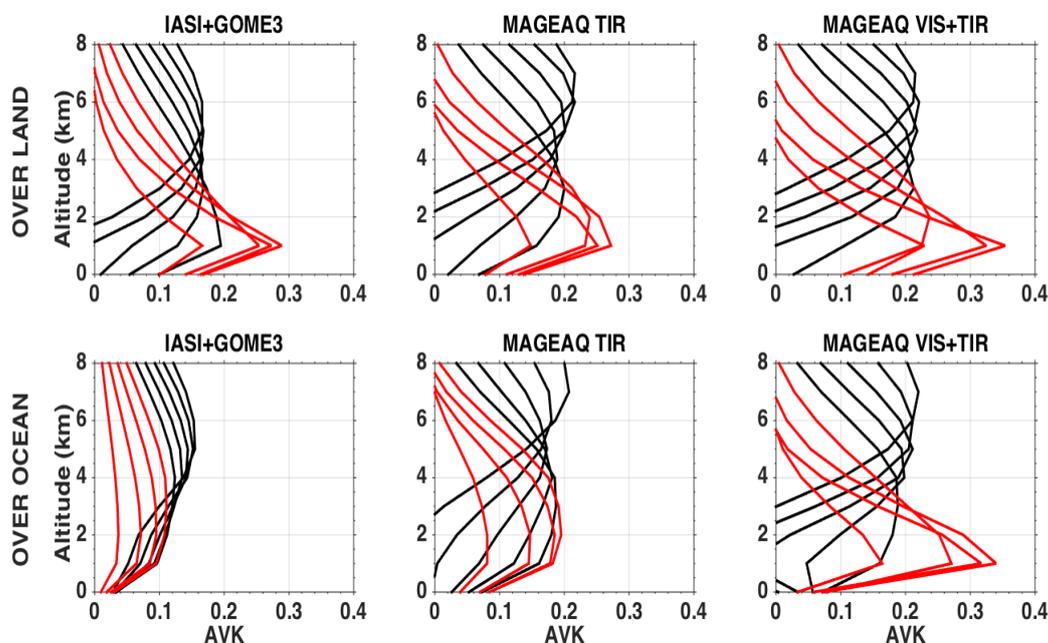


Figure 66 : Noyaux moyens typiques sur terre et sur mer pour la journée du 11 juillet 2010 pour les couplages IASI+GOME3, MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS. Le pixel sur terre se situe au nord de l’Espagne et celui sur mer sur l’Atlantique proche de la côte espagnole.

Les valeurs moyennes de DOF et de H_{max} pour la très basse troposphère (en dessous de 3 km d’altitude) pour les différents couplages sont représentées sur la figure 67. Ses moyennes prennent en compte à la fois les pixels au dessus de la mer et au dessus de la terre. Les écarts entre les valeurs de DOFs et de H_{max} pour les trois couplages de IASI et GOME-2 restent bien entendu les mêmes que ceux analysés précédemment. Le graphique met en évidence la sensibilité plus importante obtenue avec les mesures de MAGEAQ pour les deux couplages. En effet, la valeur moyenne de DOF pour MAGEAQ TIR est de 0,6 et elle est supérieure à 0,8 avec le couplage TIR+VIS, soit une valeur plus de 2 fois supérieure à la moyenne de IASI+GOME3. De plus, MAGEAQ TIR a une valeur de DOF 3 fois plus importante que celle de IASI, qui utilise également la bande TIR. Cette forte différence peut simplement s’expliquer par la différence notable vis-à-vis des paramètres instrumentaux des deux appareils (cf tableau 8). En effet, avec une résolution spectrale plus fine et un bruit radiométrique moindre, MAGEAQ a une sensibilité à l’O₃ plus importante. Enfin, comme pour le couplage IASI+GOME3, le couplage des bandes VIS et TIR de MAGEAQ a permis d’augmenter sensiblement la valeur de DOF et donc la sensibilité à l’O₃.

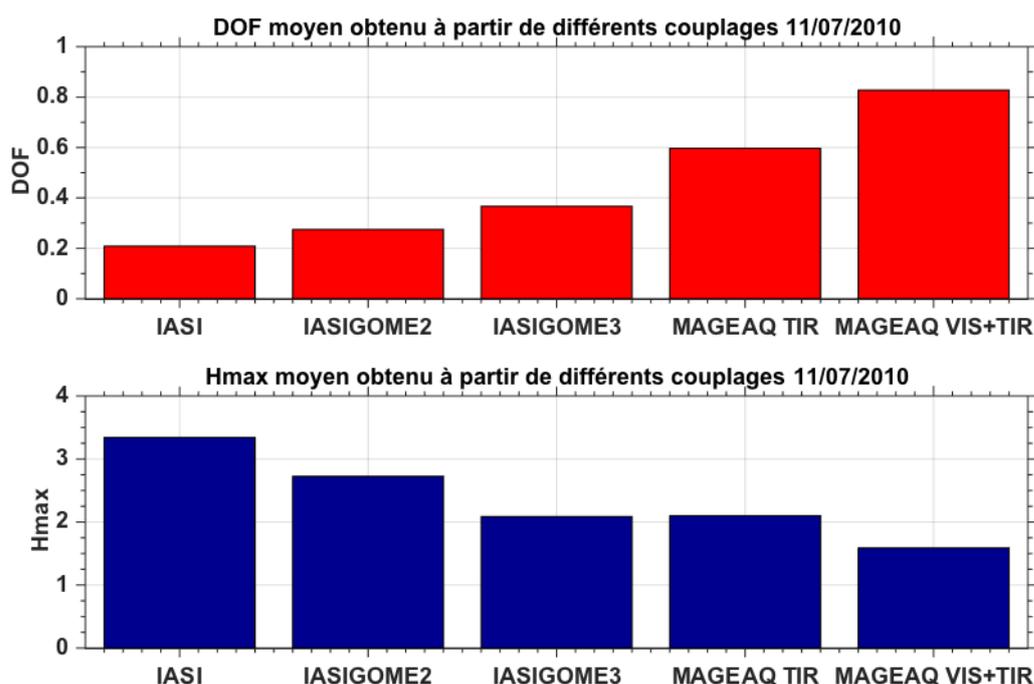


Figure 67 : Valeur moyenne de DOF et de H_{max} pour la très basse troposphère (Surface-3 km d’altitude) pour le 11 juillet 2010 à 10h pour les couplages IASI, IASIGOME2, IASI+GOME3, MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS

Vis-à-vis des valeurs moyennes de H_{max} , une diminution importante est observable pour MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS par rapport aux couplages IASI et IASI+GOME2. Et si cette différence est aussi visible entre IASI+GOME3 et MAGEAQ TIR+VIS, ce n’est pas le cas pour MAGEAQ TIR. En effet, les valeurs moyennes de H_{max} pour MAGEAQ TIR et IASI+GOME3 sont très proches (2,10 km pour MAGEAQ TIR et 2,09 km pour IASI+GOME3). Même si pour comprendre cette similitude il est nécessaire d’analyser les cartes de H_{max} pour les deux couplages, nous pouvons déjà faire des hypothèses en se

basant sur les analyses effectuées lors de l’étude précédente. En effet, même si les performances des mesures de MAGEAQ sont meilleures, la mesure MAGEAQ TIR n’utilise que le bande dans l’infrarouge thermique, alors que IASI+GOME3 utilisent les trois bandes spectrales TIR+UV+VIS qui ont chacune des avantages et des inconvénients. Et nous avons pu observer l’une des limites de la bande TIR dans l’observation de l’O₃ avec les simulations de IASI. En effet, sur les cartes de H_{max} de IASI, nous avons noté un contraste important entre les valeurs de H_{max} sur terre et sur mer. La mesure dans le TIR étant dépendante de la température de surface de la zone visée, le contraste thermique important qui existe entre la mer et la terre se retrouve ainsi dans les valeurs de H_{max} de la bande TIR. Ainsi, si les valeurs moyennes de H_{max} entre IASI+GOME3 et MAGEAQ TIR, cela doit être associé à ce contraste entre mer et terre, qui est fortement réduit avec l’ajout de l’UV et du VIS.

5.3 Restitution de la répartition horizontale de l’ozone dans la très basse troposphère

Compte tenu des écarts importants entre les valeurs moyennes de DOF et de H_{max} pour les couplages IASI et IASI+GOME2 par rapport aux couplages MAGEAQ, les cartes des deux premiers couplages ne seront pas présentées. L’observation de carte DOF entre la surface et 3 km d’altitude (figure 68) confirme ce qui a pu être analysé précédemment. En comparaison avec IASI+GOME3 dont la valeur maximum de DOF est de 0,6, les couplages MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS ont des valeurs de DOF nettement plus importante, avec respectivement un maximum autour de 0,8 et de 1,2. Pour MAGEAQ TIR, en comparaison avec IASI+GOME3, l’augmentation des valeurs de DOFs se localisent principalement sur terre, probablement associé au contraste thermique entre terre et mer. En revanche, avec le couplage MAGEAQ TIR+VIS, l’augmentation importante des DOFs se produit sur l’ensemble des pixels.

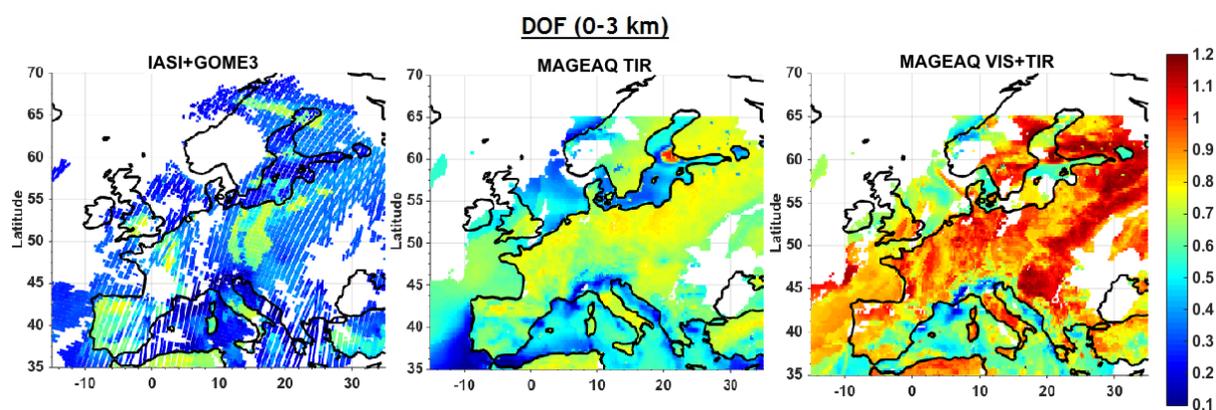


Figure 68 : Cartes de DOF (0-3 km) pour la journée du 11 juillet 2010 pour les couplages IASI+GOME3, MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+UV

L’analyse des hauteurs de sensibilité maximale entre 0 et 3 km (figure 69) montre que, contrairement au DOFs, l’étendue des valeurs de H_{max} sont pratiquement les mêmes

pour IASI+GOME3 et MAGEAQ TIR (moins de 1 km et autour de 4 km). En revanche, avec les mesures MAGEAQ TIR+VIS, H_{\max} diminue sensiblement. De plus, on peut constater que l’hypothèse émise vis-à-vis du contraste terre-mer pour MAGEAQ TIR semble se vérifier. En effet, pour une grande partie des pixels sur mer, les valeurs de H_{\max} sont nettement plus élevées que pour le reste de la carte. En ajoutant la bande VIS avec le couplage MAGEAQ TIR+VIS, ce contraste terre mer est fortement diminué.

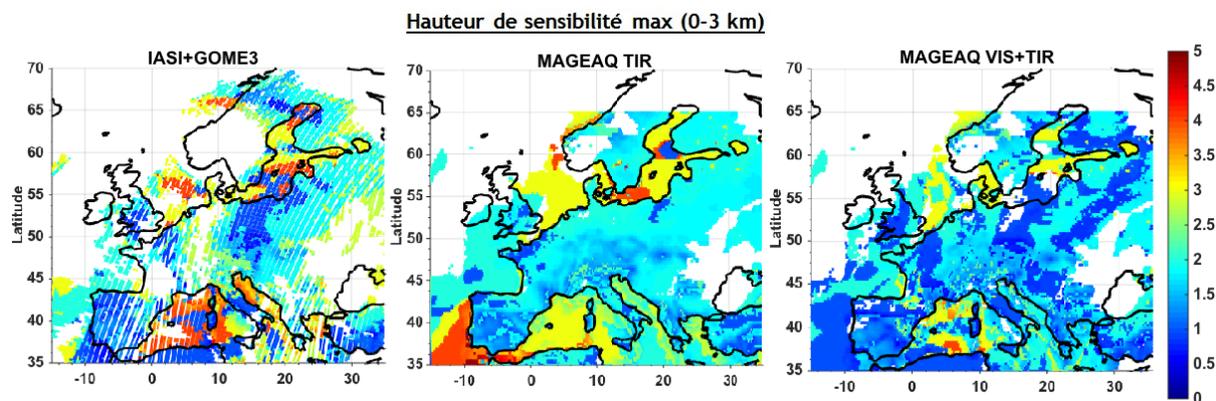


Figure 69 : Cartes de H_{\max} (0-3 km) pour la journée du 11 juillet 2010 pour les couplages IASI+GOME3, MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS

La figure 70 compare les concentrations d’ O_3 restituées par les 3 approches entre la surface et 3 km d’altitude afin de les comparer à la pseudo-réalité MOCAGE. On peut ainsi remarquer que les panaches observés par IASI+GOME3 et ceux observés par MAGEAQ TIR sont les mêmes, avec cependant des concentrations plus élevées pour le cas de MAGEAQ mais uniquement pour les panaches sur terre. Les observations sur mer sont très similaires entre les deux méthodes. Avec l’ajout de la bande VIS, on peut observer une forte augmentation des concentrations aussi bien au dessus de la terre, qu’au dessus de la mer. MAGEAQ TIR+VIS observe également des panaches d’ozone avec des concentrations plus faibles, comme celui présent au-dessus de la France, ces panaches n’étant pas observables avec les autres couplages.

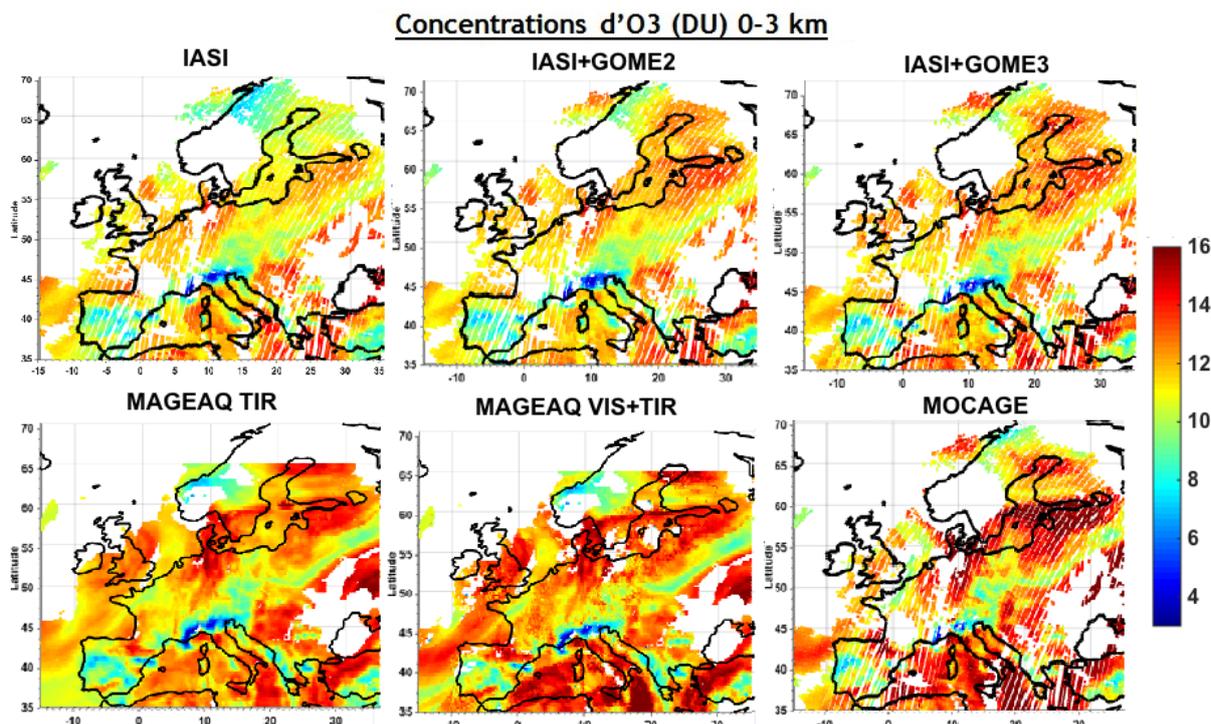


Figure 70 : Cartes de concentration d’O₃ (0-3 km) pour la journée du 11 juillet 2010 pour les couplages IASI, IASIGOME2, IASI+GOME3, MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS et pseudo réalité (MOCAGE)

Si on s’intéresse aux observations de IASI et celles de MAGEAQ TIR, toutes deux issues de mesures dans le TIR donc, on peut observer que les différences de concentrations se trouvent principalement sur terre. Ainsi, même avec un bruit radiométrique très inférieur, l’utilisation de la bande TIR seule ne permet pas d’observer avec précision les panaches d’ozone lorsqu’ils sont situés au dessus de la mer.

5.4 Evolution de la sensibilité de MAGEAQ durant le cycle diurne

MAGEAQ étant un appareil de mesure géostationnaire qui effectue donc plusieurs mesures du cycle diurne de l’ozone dans une même journée, les évolutions diurnes des valeurs de DOF et de H_{max} de MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS sont analysées (figure 71). Les mesures simulées sont calculées entre 8 et 18 h toutes les 2 h, et les valeurs de DOFs et de hauteur de sensibilité maximale H_{max} correspondent à la moyenne faite sur l’ensemble des pixels du domaine d’étude. Ainsi, au cours de la journée les valeurs de H_{max} et de DOF pour les couplages varient. On observe en début de journée une amélioration de la sensibilité de la mesure représentée par une augmentation des DOFs et une diminution de la hauteur de sensibilité. Les courbes ont toutes les deux une forme de cloche, inversée pour H_{max} , avec le maximum (minimum) pour les DOF (H_{max}) atteint à environ 10h du matin. Cette variation diurne est probablement liée à l’évolution du contraste thermique entre la surface et l’atmosphère, qui varie également au cours de la journée, qui est maximum vers 10h du matin. Or nous savons que la mesure dans

l’infrarouge thermique, comme son nom l’indique, est sensible à la température de l’atmosphère sondée.

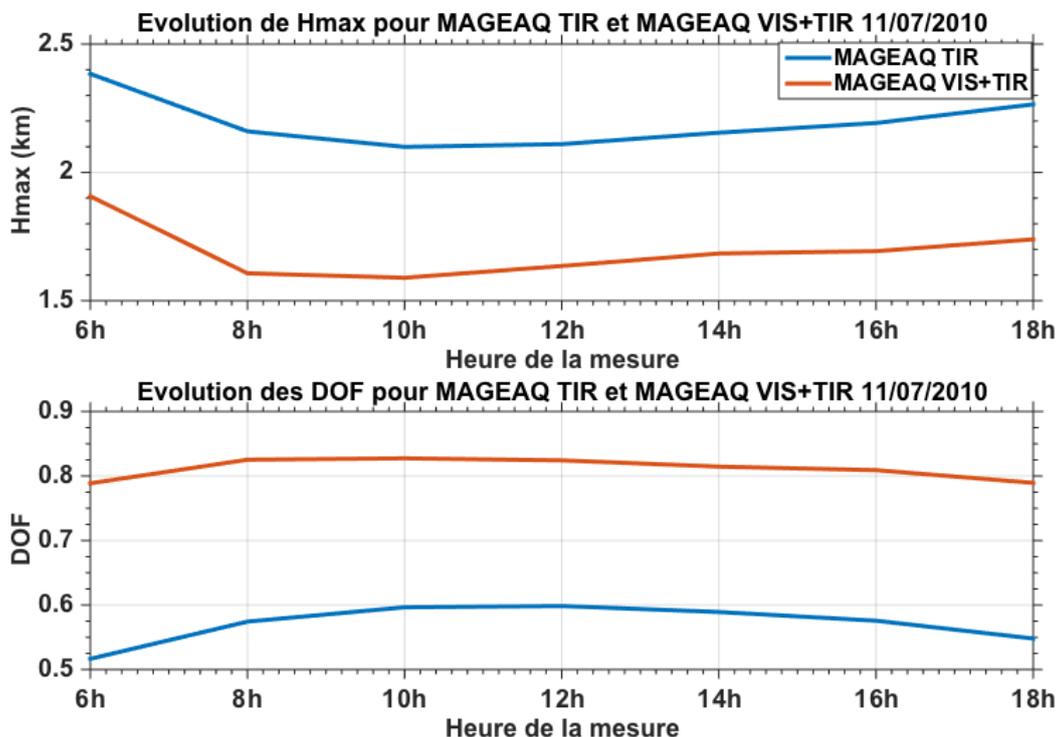


Figure 71 : Evolution journalière des valeurs de DOF et de Hmax pour la très basse troposphère (colonne 0-3km) MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS sur la journée du 11 juillet 2010

5.5 Comparaison avec d’autres simulations des performances de MAGEAQ

Une autre étude de simulation des performances de MAGEAQ pour observer la pollution à l’ozone a été effectuée par Hache et al., 2014. Dans ce cas, le simulateur utilise aussi le modèle MOCAGE comme pseudo-réalité (mais pour le cas de pollution d’ozone européen ayant lieu le 9-15 juillet 2009) et les codes de transfert radiatifs VLIDORT pour le VIS et KOPRA pour le TIR. Cependant, il existe des différences notables vis-à-vis de la configuration des deux approches d’inversion. Hache et al., 2014 utilise 21 micro-fenêtres spectrales pour le TIR et une seule micro-fenêtre spectrale VIS entre 520 et 650 nm. Le nombre de longueurs d’onde utilisées dans cette étude est beaucoup plus large (surtout pour le VIS) que celui choisi dans le cadre de cette thèse. En effet, les micro-fenêtres utilisées pour MAGEAQ sont les mêmes que celle de IASI+GOME3 dont le choix est le plus conservatif possible afin de minimiser les incertitudes issues de l’impact radiatif d’autres gaz comme la vapeur d’eau, comme effectué pour IASI+GOME2 utilisant des mesures satellitaires réelles. Par ailleurs, le simulateur de Hache et al. (2014) ne considère pas l’effet des nuages ni des aérosols, mais des bruits synthétiques ont été rajoutés aux mesures satellitaires et des perturbations aux conditions atmosphériques et de surface (profils de vapeur d’eau et température, albédo de surface). Dans cette thèse, des bruits ou perturbations ne sont pas rajoutés aux mesures ou variables, mais leurs incertitudes sont prises en compte pour l’estimation des performances de

l’approche de restitution de l’ozone, via les matrices Sa^x pour chaque variable x et S_e pour le bruit radiométrique.

Les performances simulées pour MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS obtenues dans le cadre de cette thèse et celles présentées par Hache et al., (2014) sont résumées dans le tableau 9. Ces données correspondent aux valeurs de DOF et de H_{max} entre la surface et 1 km d’altitude. On peut tout d’abord remarquer que les simulations effectuées par Hache et al., semblent avoir une sensibilité à l’ozone plus importante en terme de DOFs et des H_{max} plus proches de la surface. Cette différence peut s’expliquer par les configurations a priori différentes des deux simulations. Par exemple, la présence de nuages, non pris en compte dans la simulation de Hache et al. (2014), peut avoir un impact sur la sensibilité de la restitution et donc sur la valeur de DOFs obtenue. On peut également remarquer que pour les DOFs, l’écart entre les valeurs obtenues ici et celle de Hache et al., 2014 reste le même pour chaque configuration. Par exemple, pour la configuration TIR seul, l’écart entre les valeurs de DOFs sur mer pour les deux simulations est de +0,10 et cet écart est le même entre les valeurs de DOFs sur terre et la valeur de DOF moyenne. La différence globale pour les DOFs 0-1 km de +0,1 pour Hache et al. (2014) par rapport à la simulation de cette thèse.

On s’aperçoit aussi qu’il y a une plus forte différence entre les valeurs de hauteur de sensibilité obtenue dans le cadre de ma thèse et celles obtenues par Hache et al. (2014). Un écart d’au moins 1 km est remarqué sur l’ensemble des estimations. Cette différence pourrait s’expliquer par le nombre beaucoup plus important de longueurs d’onde prises en compte par l’inversion par Hache et al., (2014). En effet, dans le cadre de ma thèse, une sélection de longueurs d’onde a été effectuée pour diminuer l’erreur de restitution associée aux différents composés atmosphériques. Or, un plus grand nombre de longueurs d’onde apporte plus d’information sur l’ozone proche de la surface.

		Cette thèse			Hache et al., 2014		
		mer	moyenne	terre	mer	moyenne	terre
TIR	DOF 0-1km	0,11	0,17	0,21	0,21	0,27	0,31
	Hmax (km) 0-1km	2,7	2,2	1,9	□ 0,6	□ 0,5	□ 0,5
TIR + VIS	DOF 0-1km	0,22	0,29	0,34	0,28	0,34	0,40
	Hmax (km) 0-1km	1,7	1,54	1,40	□ 0,5	□ 0,4	□ 0,3

Tableau 9 : Comparaison des performances de MAGEAQ en configuration TIR et couplage TIR+VIS entre les simulations de cette thèse et celles présentées par Hache et al., 2014. Des valeurs approximatives de H_{max} Hache et al., 2014 ont été déduits des figures de AVK pour des mesures effectuées à midi (12h), présentées dans la publication.

6 Conclusion

L'utilisation d'un simulateur d'observation de IASI+GOME3 a ainsi permis d'estimer ses performances en termes de restitution de l'O₃ et de les comparer avec les observations de IASI et IASI+GOME-2. L'ensemble de ses simulations a été effectué sur un épisode de pollution européen, qui a eu lieu du 8 au 11 juillet 2010.

La comparaison entre les trois couplages de bandes spectrales TIR, TIR+UV et TIR+UV+VIS a montré des différences similaires pour les 4 journées de l'épisode. En effet, les valeurs de DOFs moyens obtenues pour IASI+GOME3 sur terre comme sur mer sont deux fois plus importantes par rapport à IASI et augmentent d'environ 50% par rapport à IASI+GOME-2. On retrouve des différences du même ordre de grandeur avec les valeurs de H_{max} dont la moyenne descend sous les 2 km d'altitude sur terre (1,6 km contre 2,4 km pour IASI+GOME-2 le 8 juillet).

Ces améliorations sont visibles sur les cartes de concentrations où, avec le couplage à trois bandes, sont observés des panaches en concentrations plus élevées et plus homogènes, l'ensemble se rapprochant aussi bien en termes de structure de panache que de concentrations de la pseudo-observation du modèle MOCAGE. L'analyse des transects des profils verticaux d'ozone pour les 3 couplages a mis en évidence que cette différence pouvait s'expliquer par une meilleure observation par IASIGOME3 de panaches d'O₃ bas en altitude et également par le fait que certains panaches, présents autour de 2 km d'altitude, n'étaient observés que par le couplage TIR+UV+VIS.

Enfin, la dernière partie de cette étude de simulations d'observation s'est portée sur la comparaison entre les observations obtenues à partir du couplage IASIGOME3 et des observations simulées de MAGEAQ en utilisant uniquement la bande TIR puis avec le couplage TIR+UV. L'intérêt de cette comparaison était double puisque d'une part elle a permis d'observer les différences entre les appareils de mesures actuels IASI et GOME-2 et une mission future, donc ayant des performances en termes de résolution spectrale et de bruit radiométrique bien meilleures. Et d'autre part, nous avons pu observer l'apport amené pour l'observation de l'O₃ par l'ajout de la bande VIS avec la comparaison MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS. Ainsi, la comparaison entre IASI+GOME3 et MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS a pu mettre en évidence une forte augmentation de la sensibilité à l'O₃ pour les deux configurations de MAGEAQ. En effet, avec MAGEAQ TIR les valeurs de DOF ont augmenté en moyenne de plus de 30%, plus marquée sur terre que sur mer, et cette valeur est plus que doublée entre IASI+GOME3 et MAGEAQ TIR+VIS aussi bien sur terre que sur mer (de 0,38 à plus de 0,83). Pour la hauteur de sensibilité maximale, on remarque que la valeur moyenne obtenue pour IASI+GOME3 et MAGEAQ TIR est très proche mais que les cartes montrent des différences importantes. En effet, ces cartes permettent de mettre en évidence le manque de sensibilité de la bande TIR sur la mer à cause du contraste thermique faible entre la surface de l'eau et la couche atmosphérique proche. Ainsi, on obtient des valeurs de H_{max} plus faible sur mer avec IASI+GOME3 et des valeurs plus faibles sur terre avec MAGEAQ TIR. C'est ce qui explique leur moyenne de H_{max} proche. Avec l'ajout de la bande VIS, ce contraste terre/mer est fortement réduit est ainsi on trouve une valeur moyenne de hauteur de sensibilité plus faible que précédemment, passant de 2,1 km à 1,6 km.

Chapitre 5 :

Observations réelles de l’ozone troposphérique par le premier couplage multispectral à 3 bandes IASI+GOME3

L’objectif de cette thèse est l’observation de la pollution à l’ozone proche de la surface à partir du couplage inédit à 3 bandes spectrales TIR+UV+VIS, à partir des mesures réelles de l’interféromètre IASI et du spectromètre GOME-2. Une fois le développement de la méthode achevée, j’ai pu estimer les performances de ce nouveau couplage à partir d’une méthode de simulation d’observations et ainsi les comparer avec celles de IASI et IASI-GOME2. Les premières analyses de cette simulation ont montré des résultats très prometteurs. En effet, l’ajout de la bande VIS a permis dans un premier temps une forte augmentation de la valeur moyenne de DOFs et une diminution toute aussi importante de la hauteur de sensibilité maximale H_{\max} qui est inférieure à 2 km d’altitude pour le couplage à 3 bandes. Ces améliorations sont aussi visibles sur les cartes de concentrations d’O₃ simulées puisque l’on a pu obtenir avec la méthode IASI+GOME3 des pseudo-observations plus proches de la pseudo-réalité fournie par le modèle MOCAGE. De même, nous avons mis en évidence la capacité nouvelle de IASI+GOME3 pour observer la présence des panaches d’ozone autour et sous les 2 km d’altitude. Si ces résultats sont très encourageants, il est nécessaire de mettre en avant que, comme ce sont des observations simulées, de nombreux paramètres susceptibles d’impacter la qualité des résultats sont ici contrôlés, ce qui n’est pas le cas lors de l’utilisation de mesures satellitaires réelles.

La dernière étape de cette étude consiste donc à mettre en œuvre le couplage spectral à trois bandes avec des mesures réelles de IASI et GOME-2, c’est-à-dire dans un cas de figure où les différents paramètres, comme le bruit radiométrique, l’albédo de surface ou la concentration des gaz, ne sont plus maîtrisés. Cela permettra ainsi d’observer l’apport réel qu’amène l’ajout du VIS dans la détection de l’ozone troposphérique. Nous allons ainsi de nouveau étudier l’épisode de pollution du 8 au 11 juillet 2010 qui a sévit en Europe en utilisant cette fois-ci les mesures réelles de IASI et GOME-2.

1 Ajustement des spectres réels de réflectance dans le visible

La première étape a été de reproduire les spectres réels de réflectance UV et VIS mesurés par GOME-2 avec VLIDORT. J'ai ainsi commencé l'étude avec les mesures réelles de GOME-2 sur la première journée de l'épisode de pollution, le 8 juillet. Des premiers tests ont mis en évidence que la configuration initiale de IASI+GOME3 ne permettait la convergence entre le spectre de réflectance simulé et le spectre réel que pour une fraction très faible de mesures. Afin de comprendre cette situation et de trouver une solution, une sélection de pixels représentant les cas les plus simples possibles pour obtenir une bonne convergence a été effectuée. Pour limiter au maximum les incertitudes sur le calcul de transfert radiatif lors de l'inversion, les pixels choisis correspondent à ceux avec une couverture nuageuse très faible, voire nulle, et une valeur d'AOD (Aerosol Optical Depth) également faible.

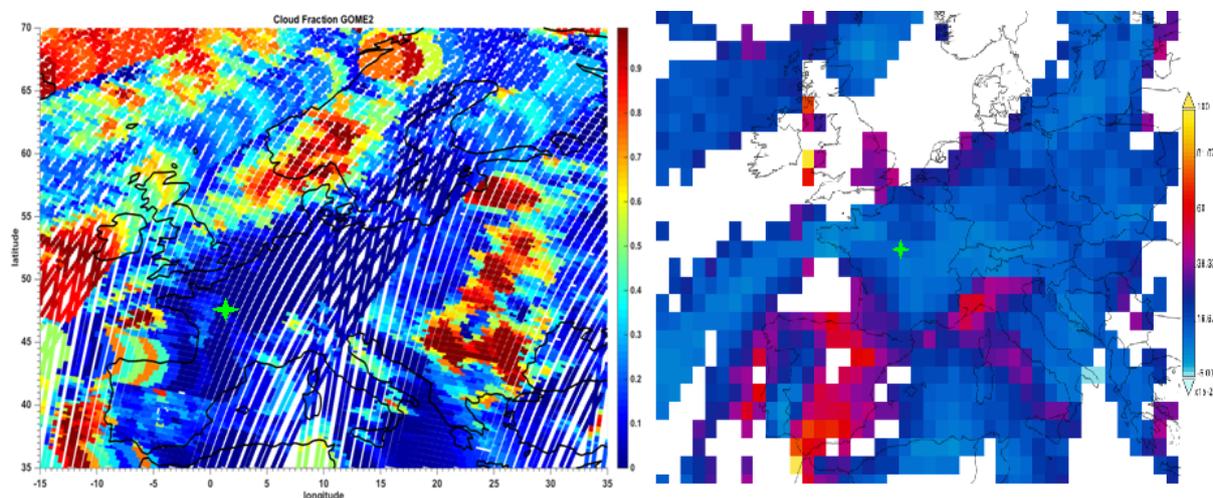


Figure 72 : Couverture nuageuse obtenue à partir des mesures de GOME-2 (gauche) et carte d'AOD moyen mesurée par MODIS à 550 nm (droite) pour la journée du 8 juillet 2010

Ainsi, les pixels ont été repérés à l'aide des cartes de l'AOD moyen mesurée par MODIS à 550 nm et de la couverture nuageuse obtenue à partir du spectre GOME-2 (voir l'exemple dans la figure 72). Les pixels choisis, qui remplissent l'ensemble de ses critères, se situent donc en France, au sud d'Orléans, comme indiqué sur les cartes par une étoile verte.

Les spectres de réflectance UV-VIS simulés par VLIDORT et les spectres réels mesurés par GOME-2 des pixels sélectionnés ont ensuite été comparés. La figure 73 présente le spectre réel de GOME-2 (en bleu) et le spectre initialement simulé par VLIDORT suite à l'inversion par KOPRAFIT (en orange) pour un de ces pixels, pour la journée du 8 juillet 2010. A noter que les observations obtenues sur les autres pixels de la sélection ont donné des résultats similaires. Pour chaque longueur d'onde, la différence entre le spectre simulé et le spectre réel est également représentée sur ce graphique. La valeur de la couverture nuageuse (CF) pour le pixel, très proche de 0, est aussi précisée. Enfin, le spectre simulé visible ici n'est pas complet comme l'est le spectre réel car seules les

longueurs d'onde des micro-fenêtres sélectionnées pour l'étude sont prises en compte (voir chapitre 3).

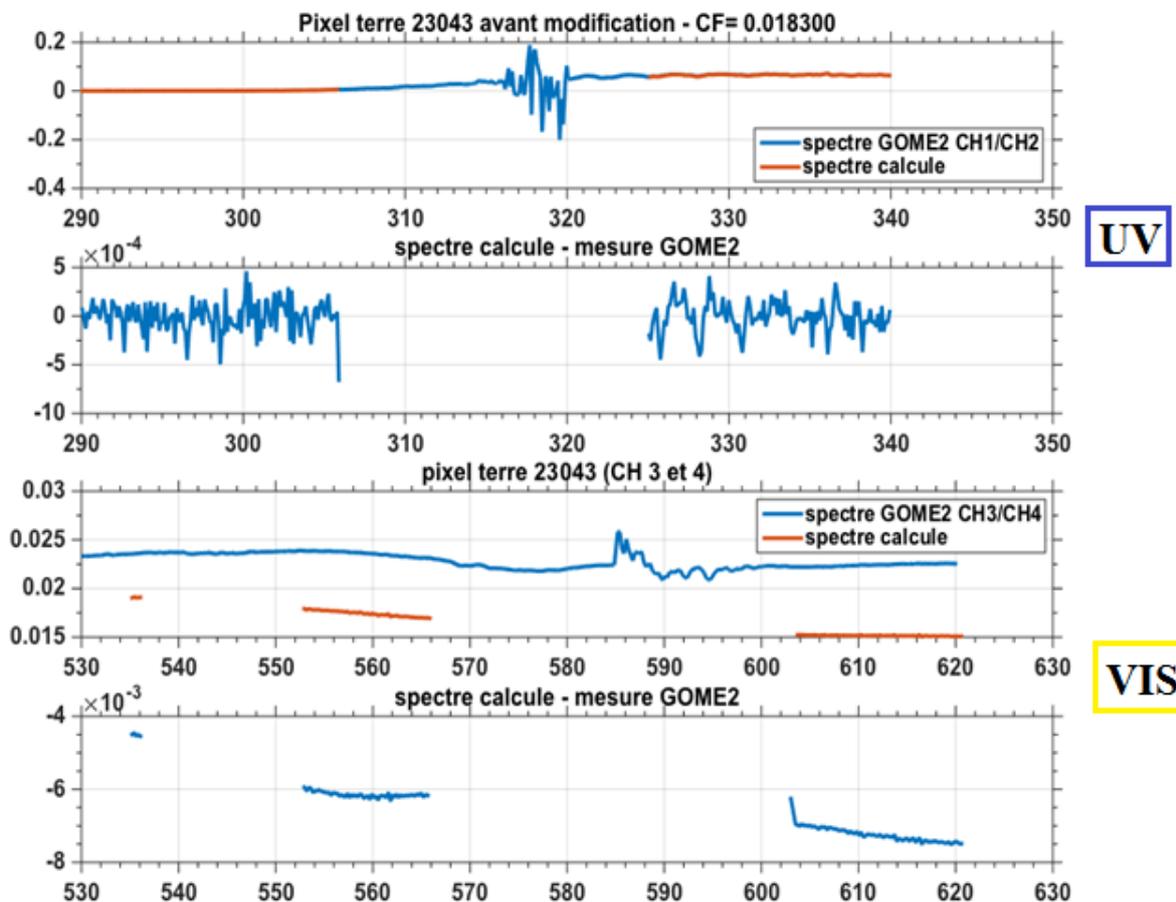


Figure 73 : Spectre de réflectance UV-VIS mesuré par GOME-2 et spectre simulé par VLIDORT puis inversé par KOPRAFIT pour le cas d'un pixel sur terre pour la journée du 8 juillet 2010

En observant ces graphiques, on s'aperçoit rapidement que l'erreur d'inversion remarquée précédemment peut s'expliquer par une mauvaise simulation du spectre de réflectance par le module de transfert radiatif VLIDORT pour la partie visible du spectre (canaux 3 et 4 de GOME-2). En effet, si pour les canaux 1 et 2 les différences entre le spectre mesuré et le spectre simulé est proche de 0, elle est très importante et négative pour les canaux 3 et 4. Cela veut dire que le spectre simulé est beaucoup plus faible que le spectre réel mais uniquement dans la partie VIS. On peut également remarquer sur le graphique que plus la longueur d'onde augmente, plus cette différence s'accroît.

Ainsi, il semble y avoir un paramètre qui impacte uniquement la partie visible du spectre de réflectance simulé et qui induit une forte sous-estimation de son intensité. Parmi les différentes possibilités, la première hypothèse qui a été testée porte sur un possible impact de l'albédo de surface et plus précisément sur les contraintes appliquées à l'albédo de surface. En effet, lors de l'inversion, pour qu'il y ait convergence entre le spectre simulé et la mesure de GOME-2, le module d'inversion va faire varier différents paramètres. Et pour éviter que ces paramètres ne varient jusqu'à des valeurs non cohérentes car trop faibles ou trop importantes, il est nécessaire de fixer des contraintes sur chacun de ses paramètres. Ainsi, pour l'albédo de surface, on obtient l'équation suivante :

$$\omega_0^{eff}(z) = \omega_0(\lambda)(a_2\lambda^2 + a_1\lambda + a_0) \quad (5.1)$$

Avec ω_0 la valeur initiale de l’albédo de surface fournie au module avant inversion, ω_0^{eff} la valeur d’albédo obtenue après inversion et a_0 , a_1 et a_2 des coefficients d’un polynôme d’ajustement de l’albédo. Lors de l’inversion de la bande UV avec IASI+GOME2, les contraintes pour la variabilité de a_0 , a_1 et a_2 sont de $2,5 \cdot 10^{-4}$, $0,01 \text{ nm}^{-1}$ et $0,01 \text{ nm}^{-2}$ en terme de leur écart type. Ainsi, lors de la configuration des différents paramètres après l’ajout de la bande VIS, les contraintes sur l’albédo de surface pour la bande Huggins dans l’UV ont été également utilisées en première approximation pour la bande VIS. Cela suppose que l’erreur sur la base climatologique de l’albédo de surface est la même entre l’UV (bande de Huggins) et le VIS (bande de Chappuis). Une erreur plus faible pour l’albédo de surface dans l’UV pourrait donc expliquer le fait que pour le pixel il y a une convergence des spectres simulé et mesuré pour l’UV mais pas pour le VIS.

Plusieurs tests sur le pixel d’étude ont donc été effectués en faisant varier ces contraintes appliquées à l’albédo de surface dans le VIS jusqu’à obtenir les résultats présentés sur la figure 74. Suite à cette modification, la différence entre le spectre simulé et le spectre mesuré par GOME-2 est faible aussi bien pour les canaux 1-2 que pour les canaux 3-4 dans le VIS, donc il y a bien une convergence sur tout le spectre. Les nouvelles contraintes qui ont permis d’obtenir ces résultats sont moins restrictives que les précédentes (d’un facteur 5) et autorisent donc une plus grande variation de la valeur de l’albédo de surface. Ses modifications ont donc été appliquées à l’ensemble des pixels de domaine et la méthode IASI+GOME3 a de nouveau été testée sur la journée du 8 juillet. J’ai ainsi pu obtenir cette fois-ci de meilleurs résultats avec un nombre de pixels où l’inversion a fonctionné plus conformes au cas étudié.

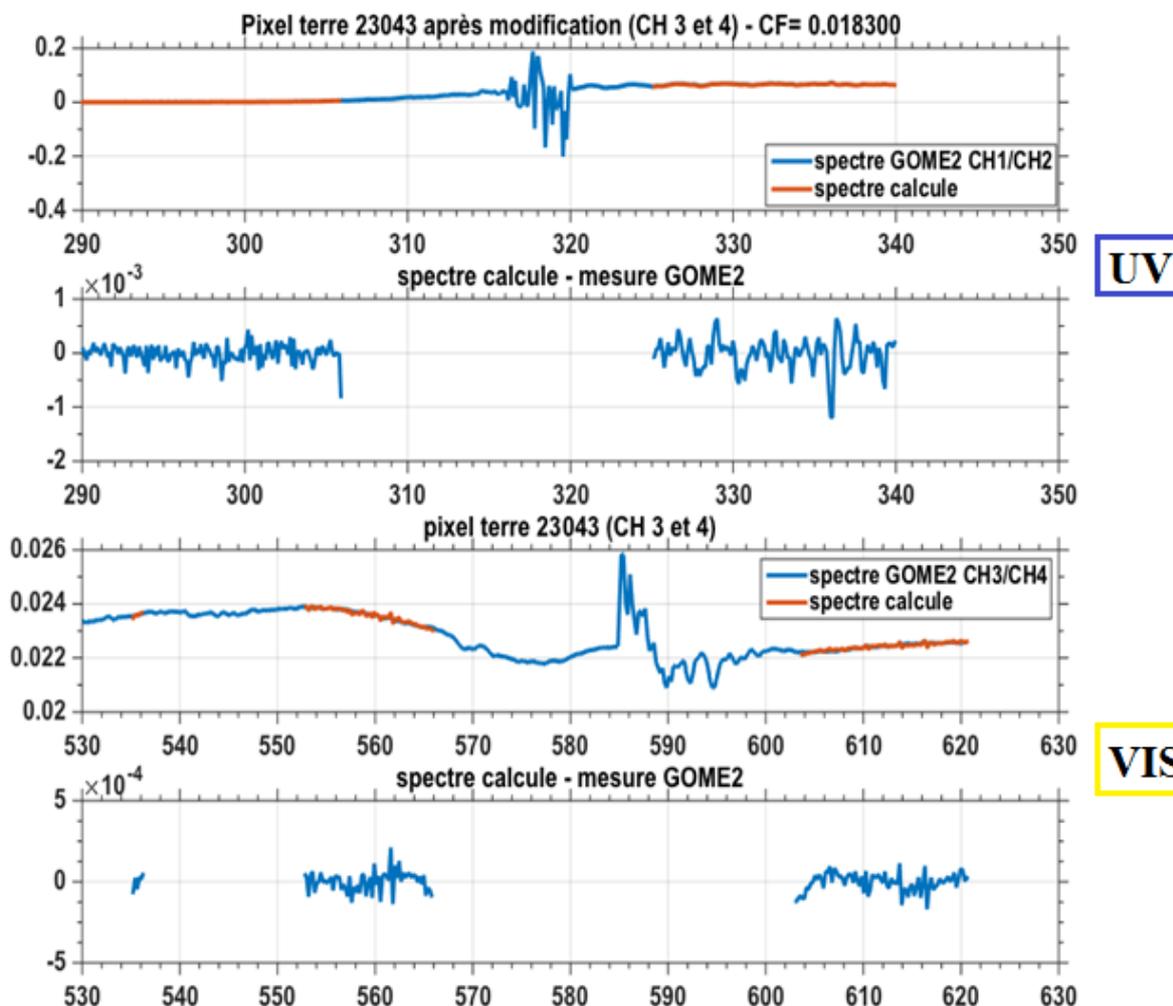


Figure 74 : Spectre de réflectance UV-VIS mesuré par GOME-2 et spectre simulé par VLIDORT puis inversé par KOPRAFIT après modification des contraintes sur l'albédo de surface pour le cas d'un pixel sur terre pour la journée du 8 juillet 2010

2 Premières observations réelles de l'ozone troposphérique avec IASI+GOME3

Une comparaison des performances d'observation d'ozone des couplages IASI+GOME2 et la nouvelle configuration de IASI+GOME3 à partir de mesures réelles de IASI et GOME-2 a été effectuée sur l'épisode de pollution du 8 et 11 juillet 2010. Ces résultats sont comparés avec les concentrations d'O₃ obtenues à l'aide des analyses MOCAGE, utilisées comme référence. Comme il s'agit de sorties d'un modèle, donc d'une simulation de l'état de l'atmosphère, il est important de noter qu'une bonne précision des analyses MOCAGE est attendue, due au fait que multiples observations ont été assimilées : celles des réseaux in situ à la surface européen et satellite de IASI et MLS (ces dernières fait par Emili et al., 2014). Les analyses MOCAGE fournissent donc un bon outil de comparaison des localisations des panaches d'ozone et aussi ses concentrations

surtout pour les cas proches des stations de mesures in situ (voir la Figure 50 avec les mesures en surface).

2.1 Concentrations d’ozone observées par IASI+GOME3

La figure 75 présente les cartes de concentrations d’O₃ entre la surface et 3 km d’altitude obtenues avec le couplage TIR+UV (à gauche) et TIR+UV+VIS (à droite) ainsi que celles fournies par le modèle MOCAGE pour la journée du 8 juillet. En observant ces cartes de concentrations, on remarque que contrairement aux cartes obtenues à l’aide du simulateur d’observation (chapitre 4), les panaches observés ici sont moins définis. En effet, avec la simulation d’observation, certains facteurs, comme le bruit radiométrique, ont été simulé de manière maîtrisée, de sorte qu’ils ne fluctuent pas. Mais avec les mesures réelles, ces paramètres fluctuent et donc vont impacter différemment chaque mesure de chaque pixel. C’est ce qui explique cette différence d’aspect. Ces cartes mettent également en évidence le fait que le couplage TIR+UV offre une couverture spatiale légèrement meilleure que le couplage TIR+UV+VIS, notamment au niveau de la mer (mers Baltique et Méditerranée).

Pour cette première journée, le modèle MOCAGE met en évidence la présence de plusieurs panaches d’O₃ dont un au niveau de la France qui s’étend de la côté Atlantique jusqu’au Nord de l’Allemagne et un deuxième qui recouvre la Méditerranée jusqu’en Turquie et qui remonte vers le Nord-est de l’Europe jusqu’à la mer Baltique. Les couplages IASI+GOME2 et IASI+GOME3 observe tous deux une partie du panache qui survole la France mais ne détecte pas l’O₃ au niveau de l’Allemagne, il n’y a pas de différences notables entre les deux méthodes d’observation ici. En revanche, pour le deuxième panache cité, on peut noter que IASI+GOME3 observe des concentrations plus importantes en Méditerranée autour de la Corse et la Sicile et au niveau de la côte Est de l’Italie mais surtout il permet d’observer l’ensemble du panache situé au Nord-est avec de fortes concentrations contrairement à IASI+GOME2 qui ne le détecte pas aussi bien. Pour mieux comprendre cette différence, nous allons par la suite analyser des transects des profils d’ozone, afin de vérifier l’altitude et la structure des panaches d’O₃ observés par les deux couplages.

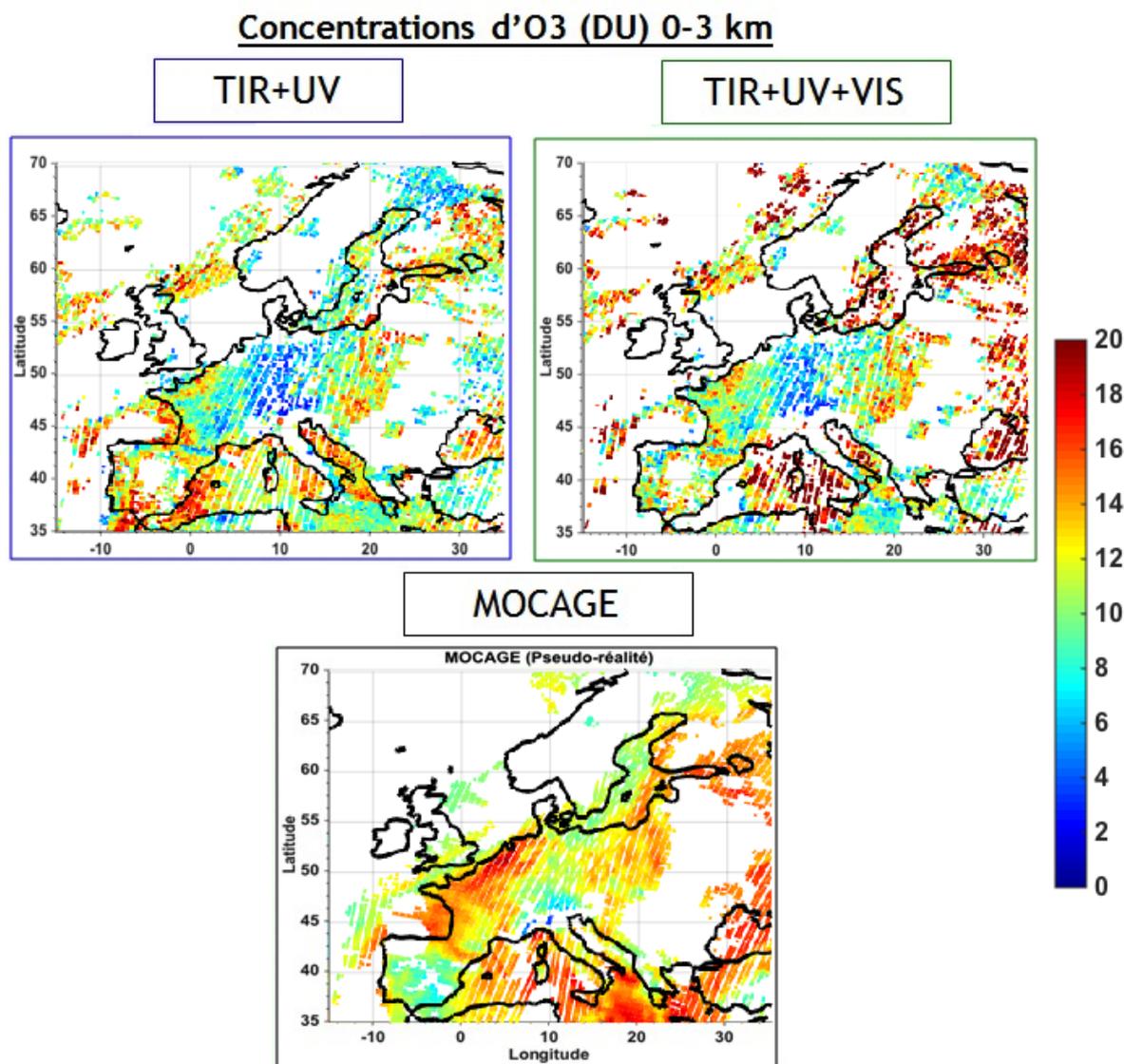


Figure 75 : Concentration d'ozone (en DU) entre la surface et 3 km d'altitude pour la journée du 8 juillet 2010 obtenues après inversions des mesures réelles de IASI et GOME-2 pour le couplage spectrale à deux bandes TIR+UV et à 3 bandes TIR+UV+VIS

La figure 76 représente des transects longitudinaux des profils verticaux d'ozone entre la surface et 15 km d'altitude pour les deux couplages et pour le modèle MOCAGE sur cette journée. Ce transect est effectué le long du parallèle de 36°N de latitude et permet d'analyser la répartition des concentrations d'O₃ sur la Méditerranée où se situe le panache survolant la Corse et la Sicile. Nous remarquons un bon accord dans la localisation et la structure des panaches d'ozone observés par IASI+GOME3 et le modèle MOCAGE avec également des concentrations élevées. Les données de MOCAGE permettent d'observer que ce panache, qui se situe entre 5 et 15 ° de longitude, s'étend de la surface jusqu'à 5 km d'altitude. A cet endroit, IASI+GOME2 observe deux panaches distincts, moins étendus et avec une concentration plus faible que pour MOCAGE et qui semble ne pas s'étendre jusqu'à la surface, quand IASI+GOME3 observe lui un panache sensiblement similaire aux observations du modèle.

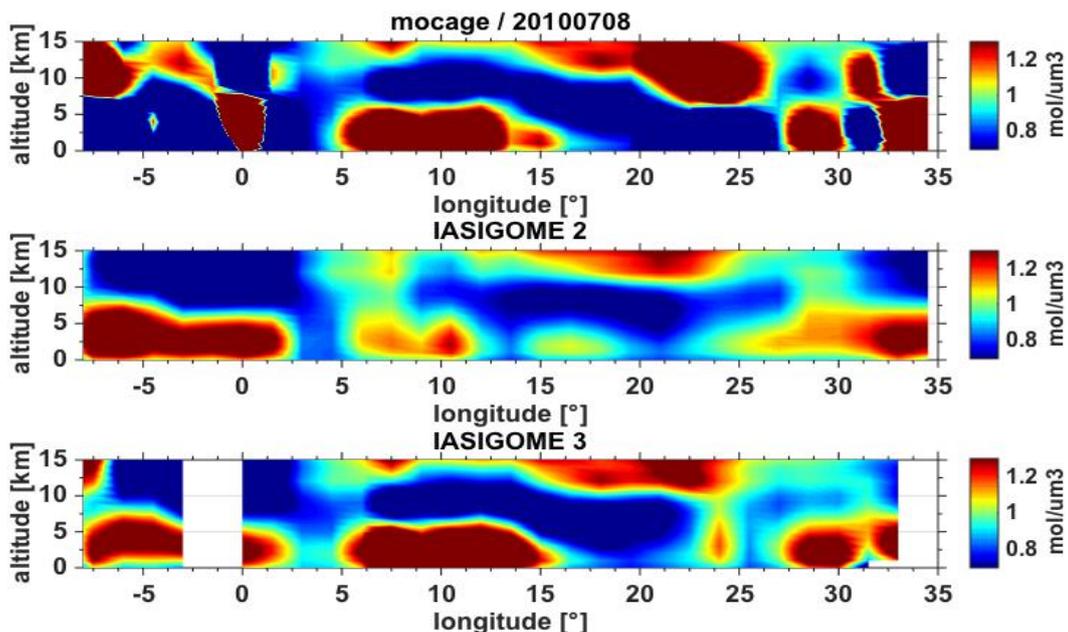


Figure 76 : Coupes transversales entre la surface et 15 km d'altitude à 36° de latitude Nord pour MOCAGE et les couplages IASI+GOME2 et IASIGOME 3 sur la journée du 8 juillet 2010

Pour la journée du 9 juillet, la couverture nuageuse, plus importante que la veille, masque une grande partie du panache auparavant situé au niveau de la France comme le montre MOCAGE (figure 77), et ainsi seul un panache d'ozone avec des concentrations élevées est situé au nord de l'Allemagne. On observe toujours pour cette journée de fortes concentrations d'ozone en Méditerranée et au niveau de la mer Baltique. Pour les deux méthodes de restitution, le panache situé sur l'Allemagne semble avoir des concentrations assez similaires, mais une différence d'observation est visible au niveau de la mer Baltique et des pays scandinaves, ainsi qu'au centre du bassin Méditerranéen avec des concentrations plus élevées pour IASI+GOME3.

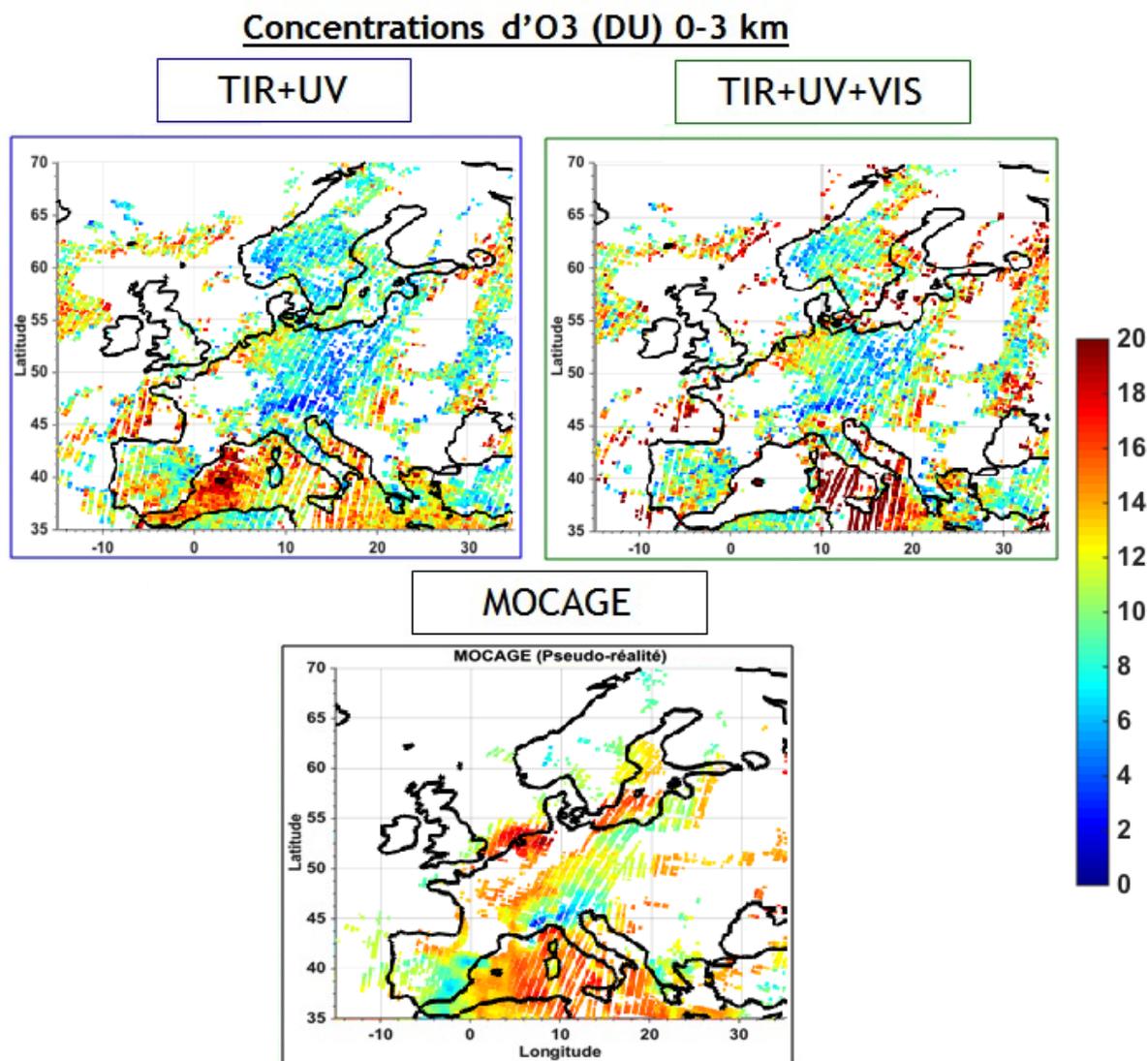


Figure 77 : Concentration d'ozone (en DU) entre la surface et 3 km d'altitude pour la journée du 9 juillet 2010 obtenues après inversions des mesures réelles de IASI et GOME-2 pour le couplage spectrale à deux bandes TIR+UV et à 3 bandes TIR+UV+VIS

Des transects des profils d'ozone ont été effectués à 54°N, c'est-à-dire sur le Danemark et au Sud de la mer Baltique (figure 78). A cette latitude le couplage IASI+GOME3 observe des concentrations plus élevées à l'Est du Danemark, entre 12 et 15° de longitude, et également plus à l'Est de l'Europe. Entre 12 et 15° de longitude, IASI+GOME3 observe un panache d'ozone en concentration élevée dans les 3 premiers kilomètres de l'atmosphère, semblables aux observations MOCAGE, et qui n'est pas détecté par IASI+GOME2.

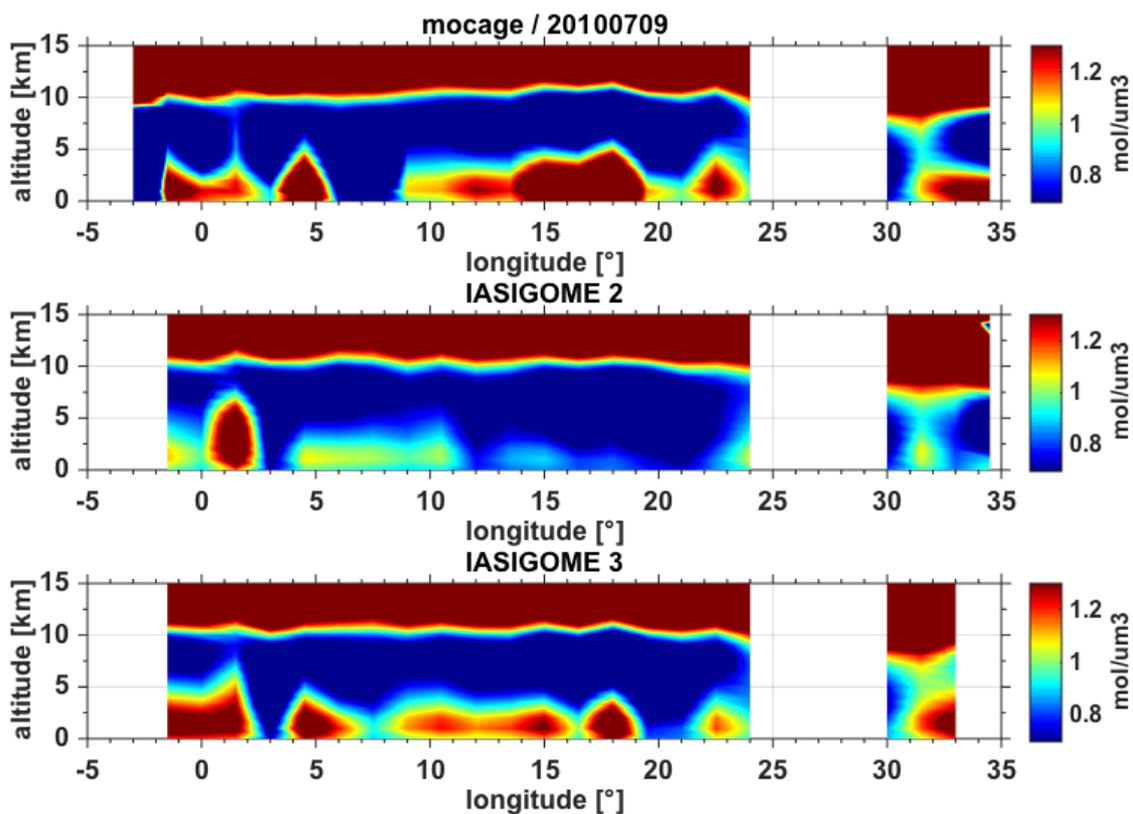


Figure 78 : Coupes transversales entre la surface et 15 km d'altitude à 54° de latitude Nord pour MOCAGE et les couplages IASI+GOME2 et IASIGOME 3 sur la journée du 9 juillet 2010

La journée suivante (10 juillet), les deux panaches suivis depuis le début de l'épisode ont continué à se déplacer vers le nord-est. Ainsi, le panache précédemment situé en France recouvre maintenant l'Allemagne, le Danemark, la mer Baltique et sa côté est ainsi que le Sud des pays scandinaves tandis que le panache méditerranéen commence à se déplacer vers les terres (figure 79). IASI+GOME2 fournit de bonnes observations du panache au-dessus de la Méditerranée sur les bords de la France et de la côte Ibérique, là où IASI+GOME3 manque de données de concentrations, même si une partie de ce panache est observable au niveau des côtes françaises. Le couplage à 3 bandes permet également de mieux observer le panache autour de la Sicile et son déplacement au-dessus des terres. Concernant panache au nord de l'Europe, la différence entre les deux couplages est visible sur le Danemark et de la mer Baltique, avec des concentrations plus élevées pour IASI+GOME3, mais surtout à l'est de la mer Baltique où seul le couplage à 3 bandes observe un panache d'ozone.

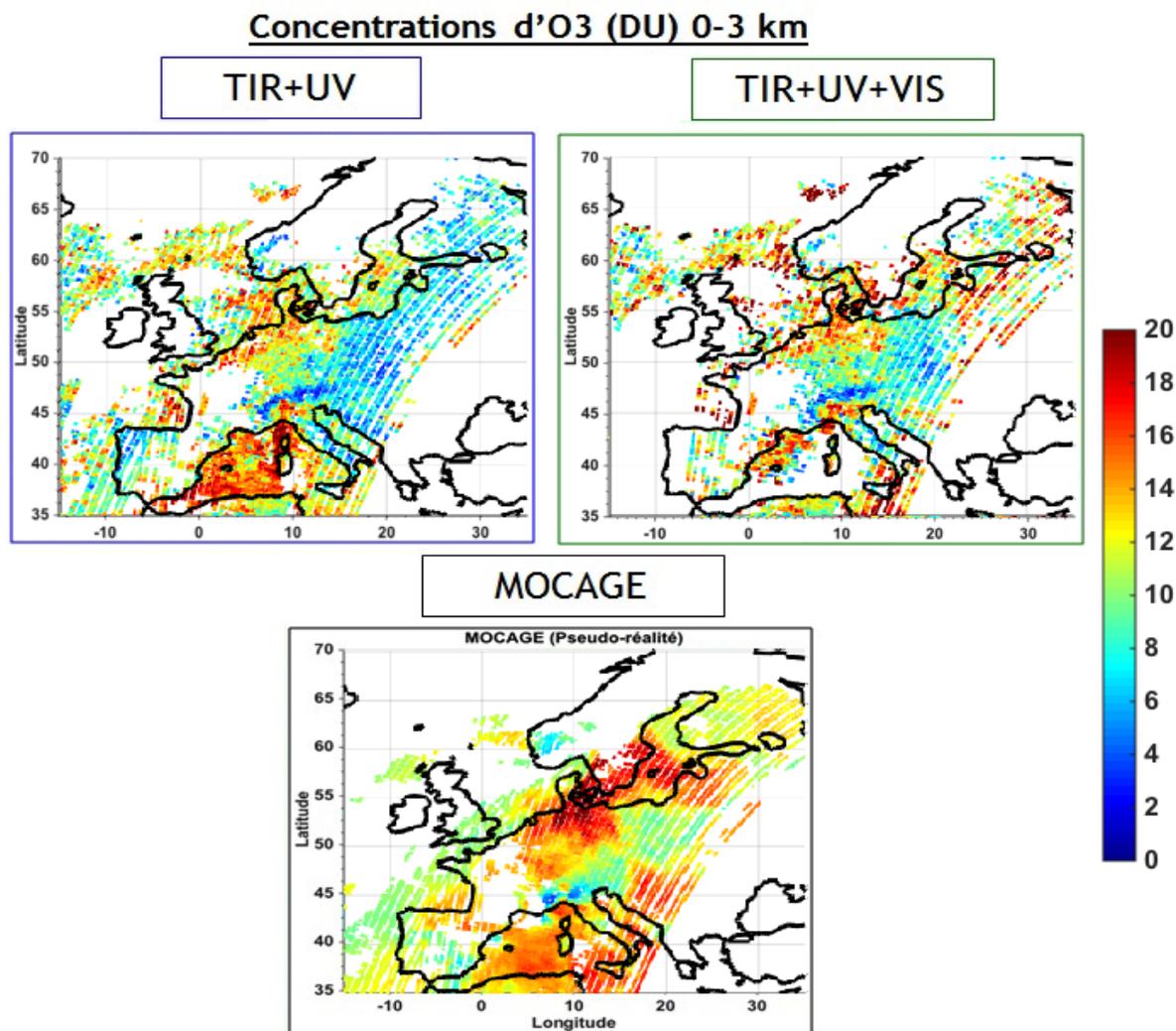


Figure 79 : Concentration d'ozone (en DU) entre la surface et 3 km d'altitude pour la journée du 10 juillet 2010 obtenues après inversions des mesures réelles de IASI et GOME-2 pour le couplage spectrale à deux bandes TIR+UV et à 3 bandes TIR+UV+VIS

Le transect choisi pour ce jour de l'évènement (la figure 80) est situé à 59°N, donc au nord de l'Ecosse. De nouveau, IASI+GOME3 et MOCAGE présentent de fortes similarités aussi bien vis-à-vis de la position des panaches que par rapport aux concentrations de ces panaches. Le couplage à trois bandes permet en effet d'observer l'ensemble du panache, quasi continu, qui s'étend de -5 à 30° de longitude, ce qui n'est pas le cas avec IASI+GOME2 qui d'une part observe des concentrations moins importantes mais aussi qui ne détecte pas l'ozone présent entre 25 et 30°, comme souligné sur les cartes de concentrations.

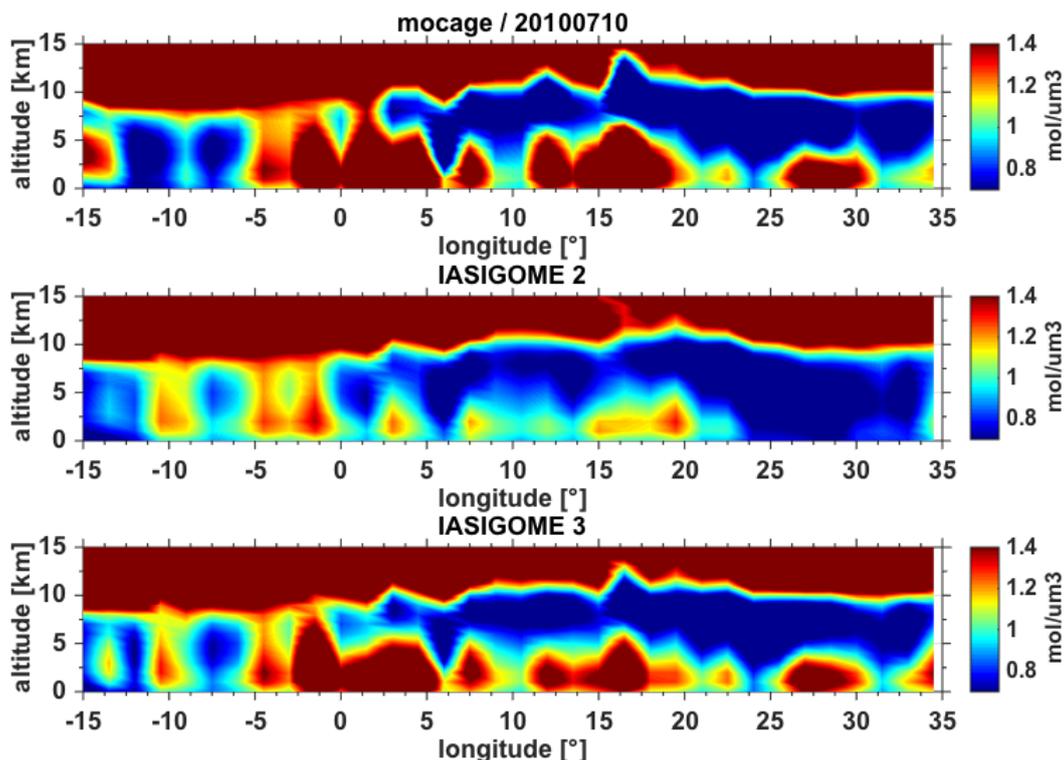


Figure 80 : Coupes transversales entre la surface et 15 km d'altitude à 59° de latitude Nord pour MOCAGE et les couplages IASI+GOME2 et IASIGOME 3 sur la journée du 10 juillet 2010

Le dernier jour de l'évènement, le 11 juillet, le panache nordique d'O₃ recouvre le nord-est de l'Europe dont les concentrations les plus élevées s'étendent du Danemark jusqu'à l'est de la mer Baltique, et au sud les concentrations les plus importantes se situent sur la Méditerranée, proche de la Grèce (figure 81).

Pour cette journée, les différences entre les observations des deux couplages sont très nettement visibles. Par exemple, avec IASI+GOME3, la quasi-totalité du panache situé au nord-est est observable, contrairement au couplage TIR+UV, et le panache localisé en Méditerranée a des concentrations plus en accord avec MOCAGE.

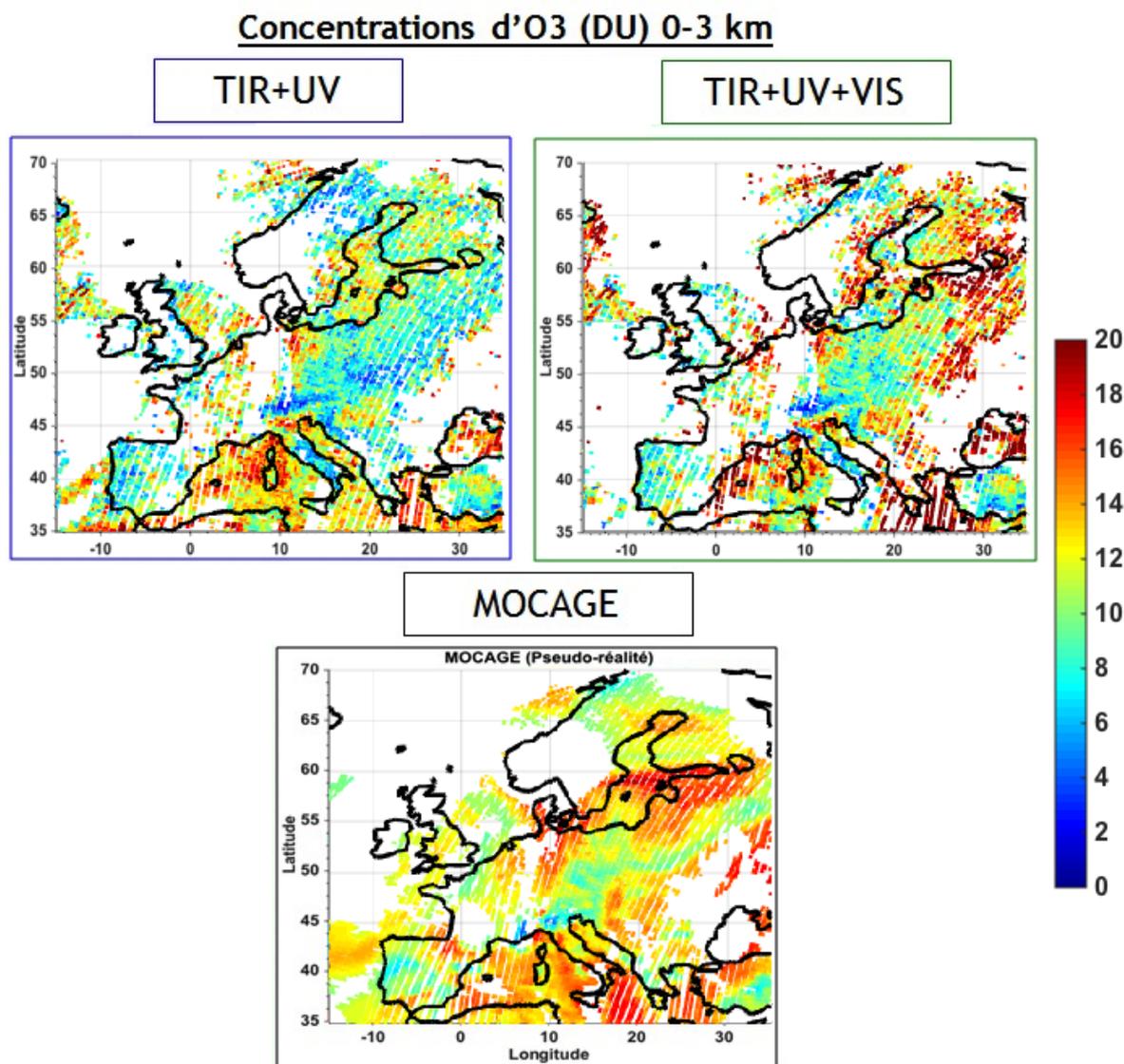


Figure 81 : Concentration d'ozone (en DU) entre la surface et 3 km d'altitude pour la journée du 11 juillet 2010 obtenues après inversions des mesures réelles de IASI et GOME-2 pour le couplage spectrale à deux bandes TIR+UV et à 3 bandes TIR+UV+VIS

Le transect entre la surface et 15 km d'altitude analysé pour la journée du 11 juillet est situé à 66°N, sur l'extrémité nord de la mer Baltique (figure 82). Ces coupes transversales mettent particulièrement en évidence la différence amenée par l'ajout de la bande VIS au couplage TIR+UV. En effet, ici le couplage IASI+GOME2 n'observe presque pas d'O₃ sous les 5 km d'altitude alors que le couplage à trois bandes spectrales permet d'observer l'ensemble des panaches d'O₃ visible sur les sorties du modèle MOCAGE, avec des concentrations de même ordre de grandeur, comme on peut le remarquer sur la coupe transversale représentant la différence de concentrations observées par IASIGOME 3 et celles observées par IASI+GOME-2. Cette figure met particulièrement en évidence le fait que l'ajout de la bande VIS permet ici l'observation de l'O₃ présent dans les 5 premiers kilomètres de l'atmosphère, avec une augmentation des concentrations allant de 0,5 à 1 mol/μm³ par rapport à celles observées par IASI+GOME-2. On peut également noter que le couplage à deux bandes spectrales permet d'observer des concentrations d'O₃ plus importantes que celles du couplage

IASIGOME 3 entre 7 et 15 km d'altitude. Ainsi, pour cette journée, le couplage à trois bandes spectrales est capable d'observer aussi bien un panache d'O₃ troposphériques proches de la surface (5-10° de longitude) qu'un panache qui s'étend de la surface à plus de 15 km d'altitude et qui correspond à un transport d'O₃ entre la troposphère et la stratosphère (25-35° de longitude).

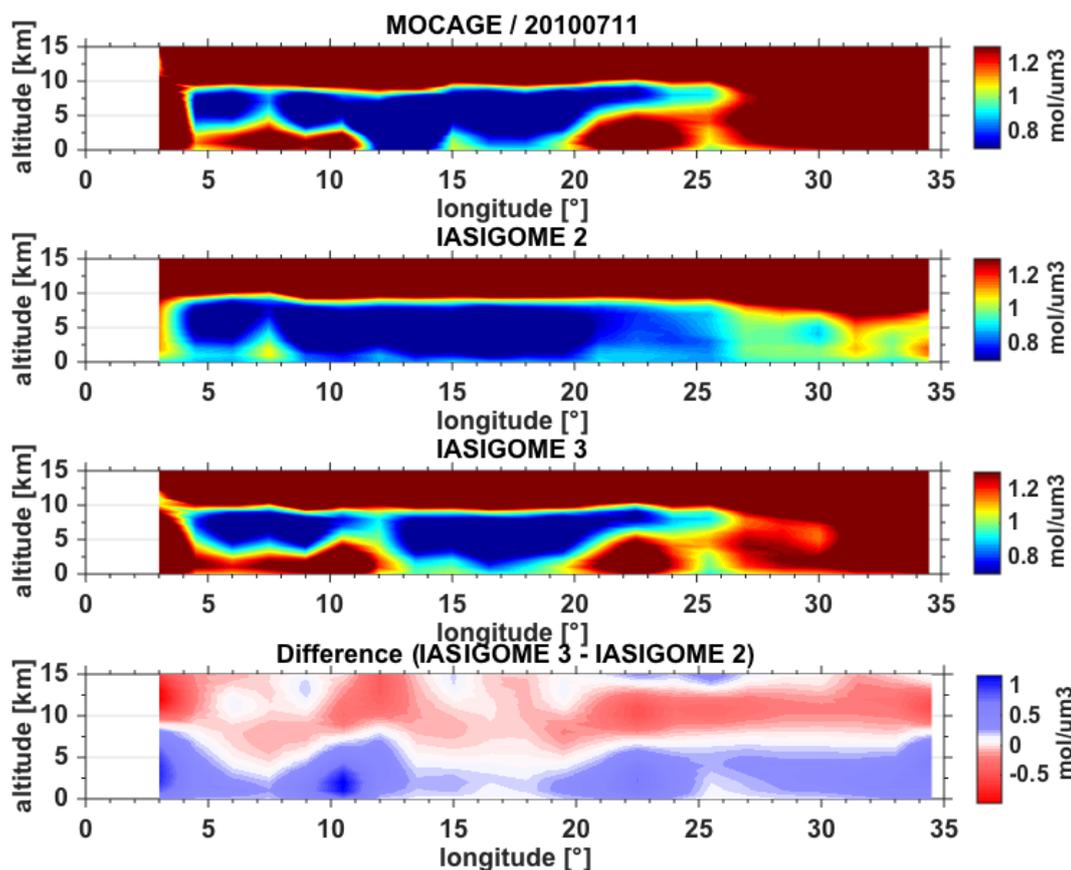


Figure 82 : Coupes transversales entre la surface et 15 km d'altitude à 66° de latitude Nord pour MOCAGE (haut), les couplages IASI+GOME-2 (milieu-haut) et IASI+GOME3 (milieu-bas) et la différence entre IASI+GOME3 et IASI+GOME-2 (bas) sur la journée du 11 juillet 2010

Une fois la comparaison entre les couplages IASI+GOME-2 et IASIGOME 3 effectuée, il est nécessaire de les confronter aux données fournies par le modèle MOCAGE. La figure 83 présente ainsi la différence entre les concentrations de MOCAGE et celles obtenues avec le couplage IASI+GOME-2, toujours dans le cas de coupes transversales entre la surface et 15km d'altitude à 66° de latitude Nord pour la journée du 11 juillet 2010. Cette figure montre ainsi que le couplage IASI+GOME-2 a tendance à surestimer ou bien à sous-estimer les concentrations d'O₃ par rapport à celle du modèle MOCAGE. On peut noter également que dans les 10 premiers kilomètres de l'atmosphère, la tendance est à la sous-estimation des concentrations.

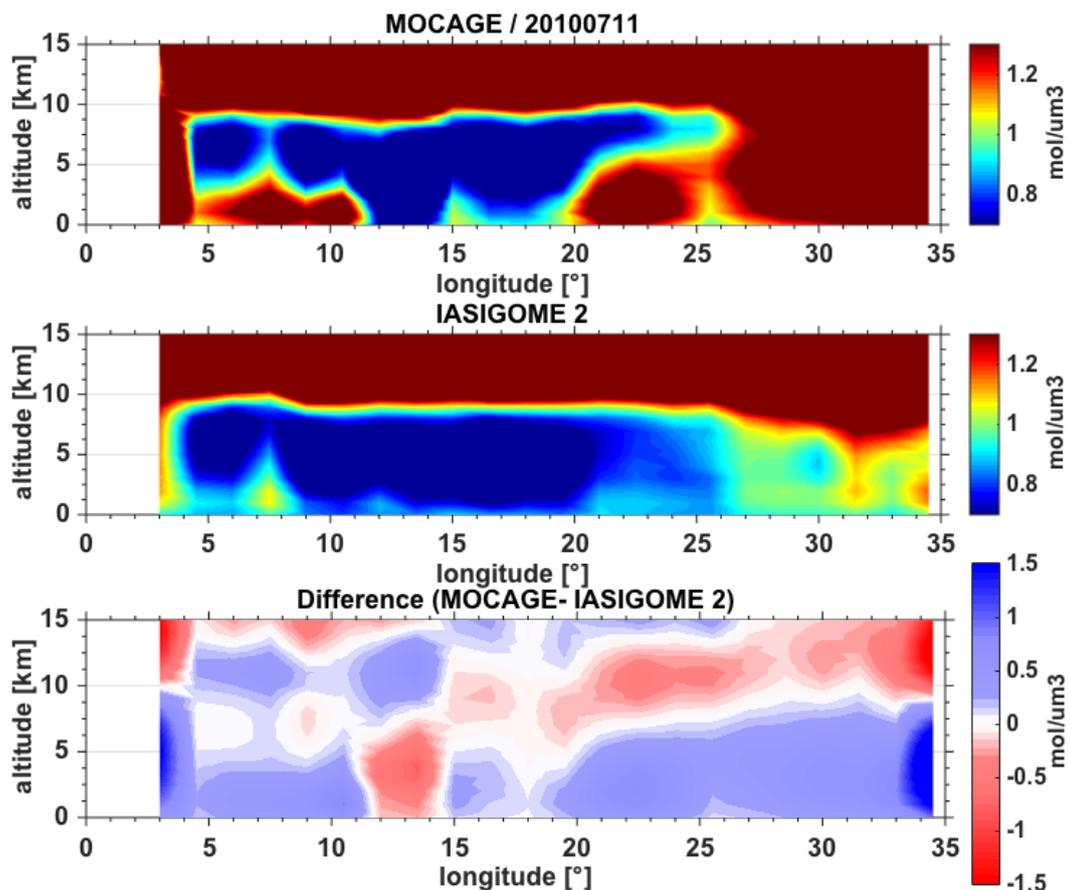


Figure 83 : Coupes transversales entre la surface et 15 km d'altitude à 66° de latitude Nord pour MOCAGE (haut), le couplage IASI+GOME-2 (milieu) et la différence entre MOCAGE et IASI+GOME-2 (bas) sur la journée du 11 juillet 2010

Enfin, la figure 84 présente cette fois-ci la différence entre les concentrations fournies par MOCAGE et celles obtenues à partir du couplage à trois bandes spectrales pour le même cas d'étude. On peut ainsi observer que, même si l'utilisation couplage IASIGOME 3 amène à la fois à une surestimation ou une sous-estimation des concentrations selon la localisation, sur l'ensemble du domaine d'étude, les concentrations obtenues sont nettement plus proches du modèle que celles du couplage à deux bandes spectrales.

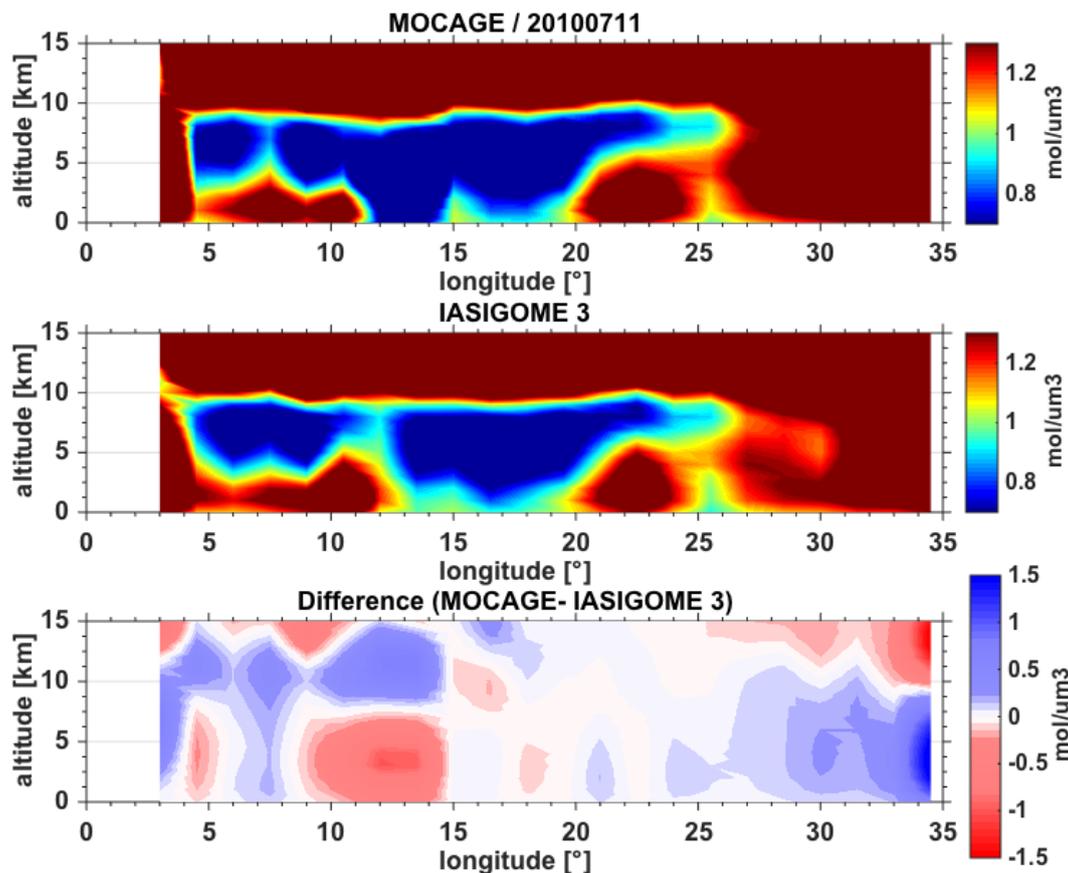


Figure 84 : Coupes transversales entre la surface et 15 km d'altitude à 66° de latitude Nord par MOCAGE (haut), le couplage IASI+GOME3 (milieu) et la différence entre MOCAGE et IASI+GOME3 (bas) sur la journée du 11 juillet 2010

2.2 Sensibilité de la version actuelle de l'approche IASI+GOME3

Pour continuer cette étude comparative des performances de IASI+GOME2 et de IASI+GOME3 pour l'observation de la pollution à l'O₃, la répartition des valeurs de DOFs et de H_{max} pour les deux couplages sur la journée du 8 juillet est présentée sur la figure 85. A noter qu'une étude similaire a été effectuée sur les trois autres journées et il en ressort des résultats et des conclusions similaires pour chacune des journées de l'épisode de pollution. Des histogrammes des valeurs de DOFs (à gauche) et de H_{max} (à droite) ne distinguent pas entre les pixels sur terre et ceux sur mer. Ces graphiques représentent l'ensemble des valeurs de DOFs et H_{max} pour les pixels après convergence et contrôle de qualité des restitutions. Or, comme cela a été observé sur les cartes de concentrations, le nombre de pixels avec des données de concentrations est plus important pour IASI+GOME2 que pour IASI+GOME3, et cette différence est en moyenne de 1200 pixels supplémentaires sur chaque journée (afin donner un ordre de grandeur, pour la journée du 8 juillet, sur les presque 18500 pixels, IASI+GOME2 a environ 7500 pixels contre 6300 pour IASI+GOME3). Les valeurs moyennes pour chaque couplage sont également précisées.

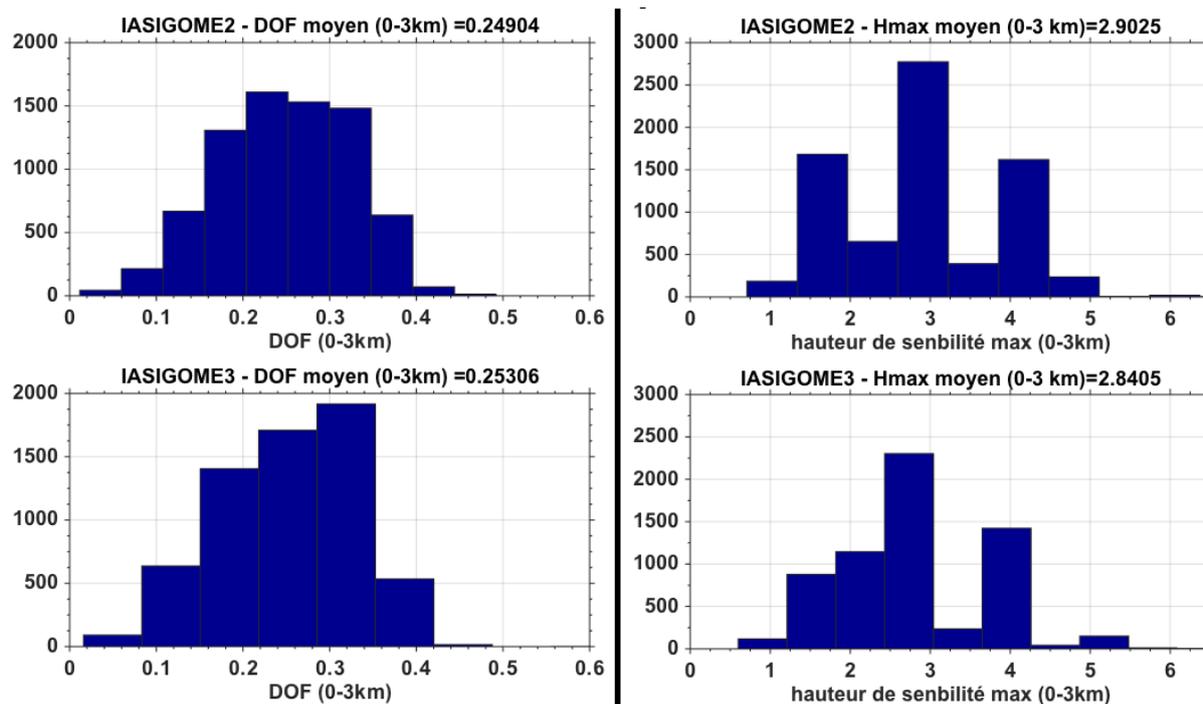


Figure 84 : Histogrammes des valeurs de DOF et de Hmax pour la très basse troposphère (0-3 km) pour les couplages IASI+GOME2 et IASI+GOME3 pour la journée du 8 juillet

Les valeurs moyennes de DOFs et de H_{\max} semblent indiquer une légère augmentation des DOFs et donc de la sensibilité à l'ozone ainsi qu'une légère diminution de la hauteur maximale de sensibilité avec l'utilisation du couplage à trois bandes spectrales. Seulement, compte-tenu du faible écart entre les moyennes pour les deux couplages mais aussi de la différence quant au nombre de pixels entre les deux ensembles, les estimations de DOFs et H_{\max} n'expliquent pas les différences notables dans les concentrations d'ozone restitués par les deux approches multispectrales (voir la section 2.1).

Pour le cas des DOFs, l'histogramme pour le couplage IASI+GOME2 semble suivre une loi normale tandis que celui pour le couplage IASI+GOME3 a un maximum légèrement décalé vers les plus grandes valeurs de DOFs. Les valeurs de DOFs médianes pour chaque couplage, très proches des valeurs moyennes, et donc avec le même écart entre les deux couplages, semblent le confirmer.

Pour la hauteur de sensibilité maximale, les valeurs médianes sont également proches des valeurs moyennes pour les deux couplages, ce qui semble de nouveau mettre en évidence l'amélioration des performances d'observation de l'ozone avec ce nouveau couplage à trois bandes. Cependant, et contrairement au cas des DOFs, il est plus compliqué de confirmer cela en observant les graphiques de répartition des valeurs de H_{\max} . En effet, si l'on compare ces deux graphiques, on remarque en premier lieu que la différence la plus importante entre les deux répartitions se trouve dans l'intervalle de valeurs comprises entre 1 et 3 km d'altitude. Ainsi pour le cas IASI+GOME2, dans cette intervalle, la majorité des pixels a une valeur de H_{\max} autour de 3 km (environ 2700 pixels), puis le deuxième groupe le plus important a une valeur proche de 1 km (1700 pixels) et enfin le troisième (600 pixels) a une valeur proche de 2 km. Pour le cas IASI+GOME3, la disposition et l'importance de ces groupes n'est pas la même puisque si le groupe majoritaire (2300 pixels) est également celui dont la valeur est située autour

de 3 km, le deuxième groupe (1200 pixels) est cette fois celui avec la valeur de 2 km et non 1km comme pour IASI+GOME2. Ainsi, pour le couplage IASI+GOME3, c'est le groupe dont le nombre de pixel est le moins important (900 pixels) qui a la plus faible valeur de Hmax.

Il est important de souligner que dans le cas de l'utilisation de mesures réelles, la différence observée entre les moyennes de DOFs et de Hmax des deux couplages est beaucoup moins marquée que celle obtenues dans le cas de la simulation des observations, où les moyennes étaient presque doublées avec l'ajout du VIS. Cela est en grande partie dû à la représentation de l'albédo de surface qui n'est pas assez fine mais également à l'impact des aérosols. En effet, c'est ce qui a été observé au début de ce chapitre quand, afin qu'il puisse y avoir une convergence des spectres simulés et mesurés de GOME-2, il était nécessaire de relâcher les contraintes appliquées à l'ajustement de l'albédo de surface, afin de permettre à l'inversion de converger en composant à la fois le manque de précision par rapport la valeur de l'albédo de surface réel et mais aussi l'impact des aérosols (non simulé explicitement dans VLIDORT dans la version actuelle de IASI+GOME3). Ainsi, c'est cette liberté, nécessaire au bon fonctionnement de la méthode, qui pourrait expliquer en partie une estimation non adéquate de la performance de la méthode en terme de la sensibilité à l'O₃.

3 Conclusions

Dans ce dernier chapitre, après avoir modifié les contraintes appliquées à l'albédo de surface pour permettre une meilleure simulation du spectre de réflectance, j'ai appliqué la méthode IASI+GOME3 sur des mesures réelles de IASI et de GOME-2, lors de l'épisode de pollution de juillet 2010. Des comparaisons avec des observations réelles issues de IASI+GOME3 et IASI+GOME2 ont été effectuées. Pour cela, nous avons utilisées comme référence des analyses du modèle MOCAGE, suite à l'assimilation des mesures in situ d'ozone à la surface du réseau AIRBASE, et des restitutions d'ozone satellitaires de IASI et MLS (contraintes sur l'ozone dans la troposphère libre et la stratosphérique, respectivement). Ces nombreuses contraintes observationnelles suggèrent une bonne précision des champs d'ozone issus de ces analyses MOCAGE.

Les résultats obtenus avec la méthode multispectrale à 3 bandes IASI+GOME3 montrent la répartition de l'ozone dans la très basse troposphère avec une bonne couverture spatiale sur terre et sur mer, avec une convergence atteinte pour un nombre légèrement plus faible de pixels qu'avec IASI+GOME2. Les comparaisons des observations réelles de IASI+GOME-2 et IASI+GOME3 montrent un bon accord pour plusieurs panaches d'ozone dans la très basse troposphère, mais aussi elles ont mis en évidence la présence de plusieurs panaches d'ozone avec des concentrations plus élevées observés par IASIGOME3, mais non par IASI+GOME2, notamment sur la Méditerranée et l'Europe de l'Est pour les quatre journées de l'épisode de pollution. Les panaches d'ozone uniquement observés avec IASI+GOME3 sont clairement présents dans les analyses MOCAGE. Cela suggère une capacité clairement accrue et unique de IASI+GOME3 pour observer la pollution à l'ozone plus proche de la surface, par rapport à IASI+GOME2.

Une analyse de la répartition en altitude de ces panaches a été effectuée en fonction des transects longitudinaux des profils verticaux d'ozone troposphériques. Ces transects, comme lors de l'analyse des observations simulées (chapitre 4), ont montré que les panaches d'ozone uniquement observés par IASI+GOME3 se situent dans les deux kilomètres plus bas de l'atmosphère. De plus, on peut noter de fortes similitudes entre IASI+GOME3 et MOCAGE notamment vis-à-vis de la répartition spatiale des panaches observés.

Pour terminer cette étude, une comparaison des valeurs de DOF et H_{\max} pour les deux couplages à 2 et 3 bandes spectrales a été effectuée. Ainsi, les valeurs moyennes sur terre et sur mer sont très proches pour les deux couplages mais avec une légère augmentation des DOFs (0,253 contre 0,249) et diminution de la hauteur de sensibilité pour IASIGOME3 (2,84 contre 2,90 km). Des histogrammes de DOFs pour IASIGOME3 semblent être décalés un peu plus vers les valeurs plus élevées. Pour H_{\max} , on retrouve également des valeurs médianes proches des valeurs moyennes. L'écart entre les valeurs de DOFs et de H_{\max} de IASI+GOME-2 et IASIGOME3 est beaucoup moins important que lors des simulations, probablement associé à l'utilisation des contraintes pour l'albédo de surface beaucoup moins restrictives pour l'approche réelle IASI+GOME3. L'estimation des performances en termes d'AVK considère probablement qu'une partie très importante de l'information fournie par les mesures VIS est utilisée pour l'ajustement de l'albédo de surface. Cependant, la nette amélioration pour restituer l'ozone avec IASI+GOME3 par rapport IASI+GOME2 indiquée par des comparaisons avec des analyses MOCAGE suggère que l'approche à 3 bandes spectrales extrait effectivement des nouvelles informations sur la répartition de l'ozone proche de la surface par rapport au couplage à 2 bandes.

Des validations approfondies des nouvelles performances de IASI+GOME3 pour restituer la pollution à l'ozone seront effectuées dans les perspectives de cette thèse par comparaison avec des mesures in situ des ballons sondes. Pour l'épisode analysé (8-11 Juillet 2010), les stations de sondage ne se situent pas dans les zones avec des panaches d'ozone uniquement observés avec IASI+GOME3. Puis l'étape suivante sera d'améliorer la représentation de l'albédo de surface afin d'améliorer la simulation des spectres GOME-2 dans le visible. Pour cela, une approche possible sera d'ajuster les contributions des composantes principales de l'albédo de surface lors de l'inversion, au lieu d'un polynôme multiplicatif, comme effectué actuellement.

Conclusions de la thèse

Dans le cadre de la surveillance de la qualité de l'air, et plus spécifiquement ici de la mesure de l'ozone troposphérique, l'analyse par mesures satellitaires présente un atout majeur puisqu'elle permet d'obtenir des mesures journalières avec une vaste couverture spatiale. Cependant, actuellement aucune observation issue d'un seul domaine spectral n'amène suffisamment d'informations pour restituer avec une précision suffisante les concentrations de l'ozone présent dans la couche limite atmosphérique, couche où se situe l'air que nous respirons. Ainsi, le couplage multispectral est une approche méthodologique qui consiste à extraire l'information sur l'ozone provenant non plus d'une seule mais de plusieurs bandes spectrales dans le but de pouvoir restituer avec une plus grande précision les concentrations d'O₃ troposphérique. Cette méthode offre un fort potentiel comme cela a été démontré avec la première approche multispectrale IASI+GOME-2 qui combine les observations TIR de IASI et UV de GOME-2 (Cuesta et al, 2013). En se basant sur ce travail, le but de ma thèse est de franchir un pas supplémentaire dans l'observation de l'ozone troposphérique en ajoutant la bande de Chappuis, présente dans le VIS et sensible à l'ozone, afin d'obtenir un couplage multispectral inédit des trois bandes spectrales TIR+UV+VIS.

La méthode d'inversion IASI+GOME-2 est une méthode qui par calcul indirect à partir des mesures de IASI et de GOME-2, va permettre d'inverser des profils d'ozone troposphérique. On parle ici de calcul indirect car le but n'est pas de calculer directement une concentration d'O₃ mais d'essayer de reproduire au mieux les effets d'absorption sur les spectres UV et TIR de l'O₃ et ainsi pouvoir remonter aux concentrations observées. Pour appliquer une telle méthode, une connaissance poussée d'une part des appareils de mesure et d'autre part de l'état de l'atmosphère est primordiale afin de pouvoir inverser les profils d'O₃ le plus précisément possible.

La première partie de cette thèse a donc consisté à fournir au module d'inversion l'ensemble des informations nécessaires au développement de la méthode d'inversion à trois bandes spectrales TIR+VIS+UV. Ainsi, après avoir complété la base de données spectroscopique du modèle de transfert radiatif VLIDORT, j'ai pu effectuer une estimation de l'erreur de restitution sur l'O₃ associée à chaque paramètre d'étude. Ce travail m'a permis de mettre en évidence l'intérêt de l'utilisation de la bande VIS pour la détection de l'O₃ troposphérique, son association avec la bande UV ayant conduit à un doublement de la valeur de DOFs, avec cependant une erreur trop importante qu'il est nécessaire de réduire. Ainsi, dans un premier cas d'étude sans aérosols ni albédo de surface, j'ai effectué une sélection de longueurs d'onde en prenant comme critère de maximisation la variable H₀₃ appelée contenu en information sur l'ozone. Cette sélection, qui a amené une forte diminution du nombre de longueurs d'onde (de plus de 2200 initialement à 362), a permis de réduire l'erreur totale tout en gardant une valeur de DOF très proche (de 0,48 à 0,46 entre 0 et 3 km d'altitude). Puis dans un deuxième

cas d'étude prenant en compte cette fois les aérosols fins et grossiers et l'albédo de surface, la méthode de sélection de longueurs d'onde n'étant plus efficace, j'ai conclu sur le besoin d'ajuster conjointement l'O₃ avec les aérosols et l'albédo de surface afin d'obtenir une erreur moyenne totale plus adaptée à une méthode d'inversion. Enfin, j'ai mis en place une nouvelle méthode d'estimation de l'albédo de surface, basée sur l'analyse en composante principale d'une base de données in situ, afin d'obtenir un albédo avec une résolution spectrale plus fine. L'ensemble de ces données a ensuite été fourni au module d'inversion et la bande du VIS a été couplée aux bandes TIR et UV.

Suite au développement de la méthode d'inversion IASI+GOME3, un simulateur d'observations a été mis en place dans le but de tester cette nouvelle méthode et d'estimer ces performances. Le principe de ce simulateur est similaire à celui de IASI+GOME3 à la différence près que les données d'entrée ne sont plus des mesures réelles de IASI et de GOME-2 mais des simulations de ces spectres. En effet, avec le simulateur, on va reproduire les spectres de mesure des deux appareils à partir des sorties du modèle MOCAGE, appelé « pseudo-réalité » et utilisées comme état de l'atmosphère, et à partir des différentes caractéristiques de IASI et GOME-2. Ces spectres simulés sont ensuite inversés afin d'obtenir une estimation des profils de concentration d'O₃ observés (ce sont les pseudo-observations). Puis la comparaison de la pseudo-réalité et des pseudo-observations permet d'obtenir une estimation des performances du couplage testé. Ainsi, les observations des couplages TIR seul, TIR+UV et TIR+UV+VIS ont été simulées et comparées sur l'épisode de pollution du 8 au 11 juillet 2010 en Europe.

L'analyse de ses observations a mis en évidence dans différences similaires entre les 3 combinaisons de bandes spectrales pour les 4 journées de l'épisode de pollution. En effet, nous avons tout d'abord pu constater une augmentation des DOFs pour IASI+GOME3 avec des valeurs deux fois plus importantes que celles de IASI et une augmentation d'environ 50% par rapport à IASI+GOME2. On retrouve des différences similaires avec les valeurs de H_{\max} dont la moyenne pour IASI+GOME3 descend sous les 2 km d'altitude. On observe en effet une moyenne à 1,6 km pour IASI+GOME3 contre 2,4 km pour IASI+GOME2.

Ces différences se retrouvent également sur les cartes de concentrations où les panaches observés ont des concentrations plus élevées et homogènes avec IASI+GOME3. De plus, les observations de IASI+GOME3, par rapport aux autres couplages, se rapproche très nettement, aussi bien en terme de structure de panaches que de concentrations, de la pseudo-réalité du modèle MOCAGE. Une analyse de ces cartes par des transects des profils d'ozone troposphérique a mis en évidence une possible explication de ces différences par la meilleure observation par IASI+GOME3 des panaches bas en altitude, autour de 2 km d'altitude, mais également par le fait que certains de ces panaches n'étaient observés que par le couplage à 3 bandes spectrales.

Par la suite, toujours dans le cadre de simulation d'observations, une comparaison des observations de IASI+GOME3 avec celles des capteurs géostationnaires MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS a été effectuée. Cette comparaison était d'autant plus intéressante puisqu'elle permettait à la fois de comparer IASI+GOME3 avec d'autres méthodes d'observations, ayant notamment la particularité d'avoir des caractéristiques instrumentales bien meilleures (bruit radiométrique nettement plus faible, résolution

spectrale plus fine dans le TIR,...), mais également car elle permettait de comparer les performances des configurations MAGEAQ TIR et MAGEAQ TIR+VIS et donc d'estimer l'apport amené par l'ajout de la bande VIS au couplage multispectral pour l'observation de l'O₃ troposphérique. Cette comparaison a mis en avant une augmentation significative des valeurs de DOFs pour les deux configurations de MAGEAQ, avec des valeurs moyennes de DOFs 30% plus élevées pour MAGEAQ TIR, et doublées pour MAGEAQ TIR+VIS par rapport à IASI+GOME3. Vis-à-vis de la hauteur de sensibilité H_{\max} , des moyennes proches entre IASI+GOME-3 et MAGEAQ TIR ont été constaté, mais une répartition géographique très différente. Des cartes de la répartition horizontale de H_{\max} ont mis en évidence un manque de sensibilité fort pour MAGEAQ TIR sur mer qui peut s'expliquer par un contraste thermique faible entre la surface de l'eau et l'atmosphère proche. Ainsi, IASI+GOME3 permet d'obtenir des valeurs de H_{\max} plus proches de la surface sur mer et MAGEAQ TIR sur terre, d'où cette moyenne proche. Enfin, on remarque qu'avec l'ajout de la bande VIS à la méthode MAGEAQ TIR, ce contraste terre/mer est fortement atténué, ce qui permet d'obtenir une valeur moyenne de H_{\max} plus faible que IASI+GOME3 (2,1 km auparavant contre 1,6 km avec MAGEAQ VIS+TIR).

Pour finir, après avoir testé la méthode IASI+GOME3 sur des observations simulées, la prochaine étape a consisté à utiliser cette fois des observations réelles de IASI et GOME-2. Pour cela, l'épisode de pollution du 8 au 11 juillet 2010 a de nouveau été étudié et les observations réelles de IASI+GOME3 ont été comparées avec celles de IASI+GOME2. Enfin, pour faire cette comparaison, des analyses du modèle MOCAGE ont été pris comme référence, grâce à une bonne précision apportée par l'assimilation des nombreuses observations d'ozone : des mesures in situ d'ozone à la surface du réseau AIRBASE et des restitutions d'ozone satellitaires de IASI et MLS.

La comparaison de ces résultats a tout d'abord mis en évidence pour IASI+GOME3 une répartition de l'ozone dans la très basse troposphère avec une bonne couverture spatiale sur terre comme sur mer, mais avec un nombre légèrement plus faibles de pixels où la convergence a été atteinte par rapport à IASI+GOME2. De plus, ces observations montrent un bon accord pour plusieurs panaches d'ozone entre les deux couplages mais met également en évidence l'observation plus réaliste par IASI+GOME3 de panaches d'ozone avec de fortes concentrations présents en Méditerranée et sur l'est de l'Europe durant les 4 jours de l'épisode, ces panaches étant présent également dans les observations MOCAGE.

Pour mieux comprendre ses différences d'observations entre les 2 couplages, une analyse des transects des profils verticaux d'ozone sur les principaux panaches d'ozone a été effectuée. De nouveau, comme lors de l'étude des simulations d'observation, on remarque que le couplage a 3 bandes spectrales a la capacité d'observer des panaches d'ozone proches de la surface, autour de 2 km d'altitude, panaches non observés par IASI+GOME-2. Ces coupes transversales mettent également en évidence de fortes similitudes entre IASI+GOME3 et les sorties du modèle MOCAGE, aussi bien vis-à-vis de la répartition spatiale des panaches que de leurs concentrations.

Enfin, une analyse des valeurs de DOFs et de H_{\max} a été effectuée entre les deux couplages. Les valeurs moyennes obtenues pour les deux configurations sont très proches, avec néanmoins une légère amélioration des DOFs et une diminution des H_{\max} pour IASI+GOME3. L'analyse des histogrammes de DOFs et H_{\max} ont montré des valeurs

de médianes proches de celles des moyennes et ont donc confirmé le léger écart notable entre les performances des deux couplages. On peut noter ici que les écarts entre les moyennes de DOFs et de H_{\max} de IASI+GOME2 et IASI+GOME3 sont très nettement moins importants que ceux observés lors des simulations. Cela peut être dû à une sous-estimation de certaines incertitudes lors de la simulation, comme l'impact de l'albédo de surface, ou à un besoin de mieux représenter ce dernier dans VLIDORT afin reproduire plus fidèlement les spectres réels de GOME-2 dans la bande VIS.

Ainsi, le développement de cette nouvelle méthode de détection de l' O_3 troposphérique à partir du couplage inédit à trois bandes spectrales TIR+UV+VIS a permis de mettre en évidence une capacité accrue et inédite de IASI+GOME3 à observer la pollution à l'ozone au plus près de la surface par rapport à la méthode à deux bandes IASI+GOME-2. Ces résultats montrent donc une très forte valeur ajoutée amenée par l'utilisation de la bande VIS pour la détection de l' O_3 troposphérique.

Perspectives

Si les premiers résultats obtenus à partir de la méthode IASI+GOME3 sont très encourageants étant donné les fortes similitudes notables avec les sorties du modèle MOCAGE, des validations approfondies des performances de IASI+GOME3 seront effectuées par comparaison avec des mesures in situ de ballons sondes. En effet, cette démarche n'a pas pu être effectuée pour l'étude de l'épisode de pollution du 8 au 11 juillet, les stations de sondage en Europe ne se situant pas dans les zones où les panaches d'O₃ uniquement observées par IASI+GOME3 étaient présents.

Par la suite, une amélioration de la représentation de l'albédo de surface dans le VIS est envisagée. En effet, il serait intéressant d'ajuster chaque composante principale de l'albédo de surface lors de l'inversion et non un polynôme comme c'est le cas actuellement. Le développement d'une nouvelle base de données de l'albédo de surface issue des données GOME-2 pourrait être aussi envisagé. Cette dernière permettrait de mieux représenter l'albédo de surface dans les simulations de VLIDORT. De même, l'inclusion de la simulation explicite de l'impact radiatif des aérosols pourrait améliorer aussi l'accord entre les spectres mesurés et simulés de GOME-2 dans VIS. Ces améliorations permettraient d'extraire des spectres VIS des informations sur l'ozone encore plus précises.

Enfin, compte tenu des différences de performances importantes observées lors de la comparaison entre IASI+GOME3 et les deux configurations de MAGEAQ, différences expliquées en grande partie par une résolution spectrale plus fine et un bruit radiométrique nettement plus faible, il serait intéressant d'effectuer une simulation d'observations du couplage IASI+GOME3 avec de meilleures caractéristiques instrumentales. Ainsi, la mise en place de simulation d'observation du couplage TIR+UV+VIS avec les observations des prochaines générations de IASI et GOME-2, respectivement IASI-NG et UVNS, est également envisagée.

Le produit innovant IASI+GOME3 développé dans cette thèse est une première en observation atmosphérique. L'intérêt scientifique de l'utilisation plus vaste de ce produit par la communauté internationale est majeur. Une fois consolidée cette approche innovante UV+VIS+TIR, le nouveau produit ozone IASI+GOME3 sera proposé aux entités nationales et internationales, comme le pôle de données français AERIS ou le service de surveillance de la qualité de l'air Copernicus, pour contribuer à la surveillance de la pollution à l'ozone à l'échelle internationale.

Acronymes

AASQUA : Associations Agréées à la Surveillance de la Qualité de l'Air
AOD : Aerosol Optical Depth
AVK : Averaging Kernels
CERFACS : Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique
CFC : Composés Chloro-Fluoro-Carboneés
CF : Cloud Fraction
COV : Composés Organique Volatils
DOF : Degres Of Freedom
DU : Dobson Unit
ECMWF : European Center Medium-Range Weather Forecast
ESA : European Space Agency
GEISA : Gestion et Etude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques
GIEC : Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Evolution du Climat
GOME : Global Ozone Monitoring Experiment
GOME-2 : Global Ozone Monitoring Experiment – second generation
Hmax : Hauteur de sensibilité maximale
HITRAN : High-resolution Transmission Molecular Absorption
IASI : Infrared Atmospheric Sounding Interferometer
IASI-NG : Infrared Atmospheric Sounding Interferometer – New Generation
KOPRA : Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm
Loi LAURE : Loi sur l'Air et l'Utilisation Rationnelle de l'Energie
LiDAR : Light Detection And Ranging
LISA : Laboratoire Inter-Universitaire des Systèmes Atmosphériques
LMT : LowerMost Troposphere
LT : Lower Troposphere
MAGEAQ : Monitoring the Atmosphere from Geostationary orbit for European Air Quality
MOCAGE : MOdèle de Chimie Atmosphérique à Grande Echelle
MPOC : Maladie Pulmonaire Obstructive Chronique
OMI : Ozone Monitoring Instrument
OMS : Organisation Mondiale de la Santé
ONU : Organisation de Nations Unies
PM : Particulate Matter
RADAR : RAdio And Raging
SAFIRE : Service des Avions Français Instrumentés pour la Recherche en Environnement
SCIAMACHY : Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chartography
SPECAT : Spetroscopie Atmosphère
TES : Tropospheric Emission Spectrometer
TIR : Thermal Infrared
TOMS : Totale Ozone Mapping Spectrometer
UV : Ultraviolet
UVNS : Ultra Violet Near-infrared Shortwave-infrared
VIS : Visible
VLIDORT : Vector Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer

Bibliographie

- Aumont, Bernard. « Production d'ozone troposphérique et régimes chimiques », s. d., 13.
- Bernstein, Lenny, R. K. Pachauri, Andy Reisinger, Lenny Bernstein, Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat, Équipe de rédaction principale, et Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat. *Changements climatiques 2007: rapport de synthèse : un rapport du groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat*, 2013.
- Brinksma, E. J., A. Bracher, D. E. Lolkema, A. J. Segers, I. S. Boyd, K. Bramstedt, H. Claude, et al. « Geophysical validation of SCIAMACHY Limb Ozone Profiles ». *Atmos. Chem. Phys.* 6, n° 1 (26 janvier 2006): 197-209.
- Brion, J., A. Chakir, D. Daumont, J. Malicet, et C. Parisse. « High-resolution laboratory absorption cross section of O₃. Temperature effect ». *Chemical Physics Letters* 213, n° 5 (15 octobre 1993): 610-12.
- Cai, Zhaonan, Yi Liu, Xiong Liu, Kelly Chance, Caroline R. Nowlan, Ruediger Lang, Rosemary Munro, et Raid Suleiman. « Characterization and Correction of Global Ozone Monitoring Experiment 2 Ultraviolet Measurements and Application to Ozone Profile Retrievals ». *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 117, n° D7. Consulté le 4 juin 2018.
- Chance, K., et R. L. Kurucz. « An improved high-resolution solar reference spectrum for earth's atmosphere measurements in the ultraviolet, visible, and near infrared ». *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Special Issue Dedicated to Laurence S. Rothman on the Occasion of his 70th Birthday., 111, n° 9 (1 juin 2010): 1289-95.
- Chance, Kelly. « Analysis of BrO Measurements from the Global Ozone Monitoring Experiment ». *Geophysical Research Letters* 25, n° 17 (s. d.): 3335-38.
- Costantino, Lorenzo, Juan Cuesta, Emanuele Emili, Adriana Coman, Gilles Foret, Gaëlle Dufour, Maxim Eremenko, Yohann Chailleux, Matthias Beekmann, et Jean-Marie Flaud. « Potential of multispectral synergism for observing tropospheric ozone by combining IR and UV measurements from incoming LEO (EPS-SG) and GEO (MTG) satellite sensors », 19:7952, 2017.
- Cuesta, J., M. Eremenko, X. Liu, G. Dufour, Z. Cai, M. Höpfner, T. von Clarmann, et al. « Satellite observation of lowermost tropospheric ozone by multispectral synergism of IASI thermal infrared and GOME-2 ultraviolet measurements over Europe ». *Atmos. Chem. Phys.* 13, n° 19 (2 octobre 2013): 9675-93.
- Dufour, G., M. Eremenko, J. Orphal, et J.-M. Flaud. « IASI observations of seasonal and day-to-day variations of tropospheric ozone over three highly populated areas of China: Beijing, Shanghai, and Hong Kong ». *Atmos. Chem. Phys.* 10, n° 8 (23 avril 2010): 3787-3801.
- Emili, E., B. Barret, S. Massart, E. Le Flochmoen, A. Piacentini, L. El Amraoui, O. Pannekoucke, et D. Cariolle. « Combined assimilation of IASI and MLS observations to constrain tropospheric and stratospheric ozone in a global chemical transport model ». *Atmos. Chem. Phys.* 14, n° 1 (8 janvier 2014): 177-98.

- Eremenko, M., G. Dufour, G. Foret, C. Keim, J. Orphal, M. Beekmann, G. Bergametti, et J.-M. Flaud. « Tropospheric Ozone Distributions over Europe during the Heat Wave in July 2007 Observed from Infrared Nadir Spectra Recorded by IASI ». *Geophysical Research Letters* 35, n° 18. Consulté le 4 juin 2018.
- Fu, D., J. R. Worden, X. Liu, S. S. Kulawik, K. W. Bowman, et V. Natraj. « Characterization of ozone profiles derived from Aura TES and OMI radiances ». *Atmos. Chem. Phys.* 13, n° 6 (26 mars 2013): 3445-62.
- Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat. *Bilan 2001 des changements climatiques les éléments scientifiques: rapport du Groupe de travail I du GIEC*. Genève: Organisation météorologique mondiale, 2001.
- Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat. *Changements climatiques 1995: deuxième rapport d'évaluation du GIEC*. Genève]; [Nairobi: Organisation météorologique mondiale ; Programme des Nations unies pour l'environnement, 1996.
- Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat *Changements climatiques 2014: incidences, adaptation et vulnérabilité : résumés, foire aux questions et encarts thématiques : contribution du groupe de travail II au cinquième Rapport d'évaluation du Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat*. Genève (Suisse): Organisation météorologique mondiale, 2014.
- Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat, Organisation météorologique mondiale, et Programme des Nations Unies pour l'environnement. *Changement climatique: les évaluations du GIEC de 1990 et 1992 : premier rapport d'évaluation du GIEC : aperçu général et résumés destinés aux décideurs et supplément 1992 du GIEC.*, 1992.
- Hache, E., J.-L. Attié, C. Tourneur, P. Ricaud, L. Coret, W. A. Lahoz, L. El Amraoui, et al. « The added value of a visible channel to a geostationary thermal infrared instrument to monitor ozone for air quality ». *Atmos. Meas. Tech.* 7, n° 7 (22 juillet 2014): 2185-2201.
- Hess, M., P. Koepke, et I. Schult. « Optical Properties of Aerosols and Clouds: The Software Package OPAC ». *Bulletin of the American Meteorological Society* 79, n° 5 (1 mai 1998): 831-44.
- Jacob, Daniel J., et Darrell A. Winner. « Effect of climate change on air quality ». *Atmospheric Environment*, *Atmospheric Environment - Fifty Years of Endeavour*, 43, n° 1 (1 janvier 2009): 51-63.
- Jaumouillé, E., S. Massart, A. Piacentini, D. Cariolle, et V.-H. Peuch. « Impact of a time-dependent background error covariance matrix on air quality analysis ». *Geosci. Model Dev.* 5, n° 5 (6 septembre 2012): 1075-90.
- Jerrett, Michael, Richard T. Burnett, C. Arden Pope, Kazuhiko Ito, George Thurston, Daniel Krewski, Yuanli Shi, Eugenia Calle, et Michael Thun. « Long-Term Ozone Exposure and Mortality ». *The New England Journal of Medicine* 360, n° 11 (12 mars 2009): 1085-95.

- Kleipool, Q. L., M. R. Dobber, J. F. de Haan, et P. F. Levelt. « Earth Surface Reflectance Climatology from 3 Years of OMI Data ». *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 113, n° D18.
- Koelemeijer, Robert, Piet Stammes, J W. Hovenier, et Johan Dehaan. « A fast method for retrieval of cloud parameters using oxygen A band measurements from the Global Ozone Monitoring Experiment ». *J. Geophys. Res.* 106 (27 février 2001): 3475-90.
- Kulawik, S. S., G. Osterman, D. B. A. Jones, et K. W. Bowman. « Calculation of altitude-dependent tikhonov constraints for TES nadir retrievals ». *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 44, n° 5 (mai 2006): 1334-42.
- Lelieveld, J., J. S. Evans, M. Fnais, D. Giannadaki, et A. Pozzer. « The Contribution of Outdoor Air Pollution Sources to Premature Mortality on a Global Scale ». *Nature* 525, n° 7569 (septembre 2015): 367-71.
- Lin, Shao, Xiu Liu, Linh H. Le, et Syni-An Hwang. « Chronic Exposure to Ambient Ozone and Asthma Hospital Admissions among Children ». *Environmental Health Perspectives* 116, n° 12 (décembre 2008): 1725-30.
- Liu, X., P. K. Bhartia, K. Chance, R. J. D. Spurr, et T. P. Kurosu. « Ozone profile retrievals from the Ozone Monitoring Instrument ». *Atmos. Chem. Phys.* 10, n° 5 (12 mars 2010): 2521-37.
- Liu, X., K. Chance, C. E. Sioris, R. J. D. Spurr, T. P. Kurosu, R. V. Martin, et M. J. Newchurch. « Ozone Profile and Tropospheric Ozone Retrievals from the Global Ozone Monitoring Experiment: Algorithm Description and Validation ». *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 110, n° D20. Consulté le 4 juin 2018.
- McPeters, Richard D., Gordon J. Labow, et Jennifer A. Logan. « Ozone Climatological Profiles for Satellite Retrieval Algorithms ». *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 112, n° D5. Consulté le 4 juin 2018.
- Morgan, P. B., E. A. Ainsworth, et S. P. Long. « How Does Elevated Ozone Impact Soybean? A Meta-Analysis of Photosynthesis, Growth and Yield ». *Plant, Cell & Environment* 26, n° 8 (s. d.): 1317-28.
- Parker, Jennifer D., Lara J. Akinbami, et Tracey J. Woodruff. « Air Pollution and Childhood Respiratory Allergies in the United States ». *Environmental Health Perspectives* 117, n° 1 (janvier 2009): 140-47.
- Payan, S. *Cours sur les algorithmes d'inversion, École thématique CNRS SPECATMO*. Ile de Ré, 2009.
- Rage, E., B. Jacquemin, R. Nadif, M.-P. Oryszczyn, V. Siroux, I. Aguilera, F. Kauffmann, et N. Künzli. « Total Serum IgE Levels Are Associated with Ambient Ozone Concentration in Asthmatic Adults ». *Allergy* 64, n° 1 (s. d.): 40-46.
- Rodgers, Clive D. *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*. World Scientific, 2000.

- Rothman, L. S., D. Jacquemart, A. Barbe, D. Chris Benner, M. Birk, L. R. Brown, M. R. Carleer, et al. « The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database ». *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 96, n° 2 (1 décembre 2005): 139-204.
- Sellitto, P., A. Di Noia, F. Del Frate, A. Burini, S. Casadio, et D. Solimini. « On the role of visible radiation in ozone profile retrieval from nadir UV/VIS satellite measurements: An experiment with neural network algorithms inverting SCIAMACHY data ». *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 113, n° 12 (1 août 2012): 1429-36.
- Spurr, Robert J. D. « VLIDORT: A linearized pseudo-spherical vector discrete ordinate radiative transfer code for forward model and retrieval studies in multilayer multiple scattering media ». *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 102, n° 2 (1 novembre 2006): 316-42.
- Steck, Tilman. « Methods for Determining Regularization for Atmospheric Retrieval Problems ». *Applied Optics* 41, n° 9 (20 mars 2002): 1788-97.
- Steck, Tilman, et Thomas von Clarmann. « Constrained Profile Retrieval Applied to the Observation Mode of the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding ». *Applied Optics* 40, n° 21 (20 juillet 2001): 3559-71.
- Stiller, Gabriele P., Thomas von Clarmann, Bernd Funke, Norbert Glatthor, Frank Hase, Michael Höpfner, et Andrea Linden. « Sensitivity of trace gas abundances retrievals from infrared limb emission spectra to simplifying approximations in radiative transfer modelling ». *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 72, n° 3 (1 février 2002): 249-80.
- Tikhonov, Andreï Nikolaïevitch. « On the solution of ill-posed problems and the method of regularization, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 151:3 (1963), 501–504 ». Consulté le 4 juin 2018.
- Worden, H. M., J. A. Logan, J. R. Worden, R. Beer, K. Bowman, S. A. Clough, A. Eldering, et al. « Comparisons of Tropospheric Emission Spectrometer (TES) Ozone Profiles to Ozonesondes: Methods and Initial Results ». *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 112, n° D3. Consulté le 4 juin 2018.
- Worden, John, Xiong Liu, Kevin Bowman, Kelly Chance, Reinhard Beer, Annmarie Eldering, Michael Gunson, et Helen Worden. « Improved Tropospheric Ozone Profile Retrievals Using OMI and TES Radiances ». *Geophysical Research Letters* 34, n° 1. Consulté le 4 juin 2018.
- Zoogman, Peter, Xiong Liu, Kelly Chance, Qingsong Sun, Crystal Schaaf, Tobias Mahr, et Thomas Wagner. « A climatology of visible surface reflectance spectra ». *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 180 (1 septembre 2016): 39-46.
- Zyryanov, D., G. Foret, M. Eremenko, M. Beekmann, J.-P. Cammas, M. D'Isidoro, H. Elbern, et al. « 3-D Evaluation of Tropospheric Ozone Simulations by an Ensemble of Regional Chemistry Transport Model ». *Atmospheric Chemistry and Physics* 12, n° 7 (3 avril 2012): 3219-40.

« Observation satellitaire de la pollution à l’ozone par synergie multispectrale à trois bandes Ultraviolet+Visible+Infrarouge »

La qualité de l’air est un enjeu environnemental majeur de notre société. Cette thèse se focalise sur l’observation depuis l’espace du polluant gazeux majeur, l’ozone troposphérique. Les instruments satellitaires de nouvelle génération permettent de le mesurer journalièrement aux échelles régionales à globale. Cependant, les mesures d’un seul domaine spectral n’amènent pas d’information suffisante pour quantifier les concentrations de l’ozone dans la couche limite atmosphérique, où se situe l’air que nous respirons.

Le couplage des mesures de multiples domaines spectraux offre un fort potentiel pour mieux caractériser la pollution à l’ozone. La première approche multispectrale à 2 bandes combinant les mesures de l’infrarouge (IR) de IASI et l’ultraviolet (UV) de GOME-2 a été développée au laboratoire LISA, que j’ai intégré dans le cadre de ma thèse.

L’objectif de mon travail de thèse est de franchir un pas supplémentaire dans la quantification de la pollution à l’ozone en incluant la bande visible (VIS) de Chappuis, afin de développer un couplage multispectral inédit à trois bandes spectrales UV+VIS+IR. Premièrement, j’ai mis au point une approche pour extraire l’information sur l’ozone des spectres VIS de GOME-2, en sélectionnant les longueurs d’onde affectées majoritairement par l’absorption à l’ozone et rejetant celles avec des absorptions d’autres gaz, ainsi que déterminant les variables d’ajustement conjoint de l’approche (profil vertical d’ozone, albédo de surface, shifts spectraux, etc) et les bases de données nécessaires pour simuler les spectres VIS (albédo de surface, spectroscopie).

Ensuite, j’ai mis en œuvre la méthode multispectrale à trois bandes UV+VIS+IR, premièrement sur des observations simulées défilantes de IASI et GOME-2 et géostationnaires de MAGEAQ afin d’estimer l’amélioration en terme de sensibilité et précision, par rapport aux méthodes existantes.

Dernièrement, j’ai appliqué l’approche multispectrale à 3 bandes à des observations satellitaires réelles de IASI et GOME-2. Des comparaisons avec d’autres données montrent des meilleures performances des nouvelles observations UV+VIS+IR pour caractériser des événements de pollution à l’ozone, par rapport à l’approche à 2 bandes.

« Satellite observation of ozone pollution by a 3-band mutispectral synergism Ultraviolet+Visible+Infrared »

Air quality is a major environmental issue for our society. This PhD thesis focuses on spaceborne observation of the major gaseous pollutant. Tropospheric ozone. New generation satellite instruments allow measuring it daily at regional to global scales. However, single spectral domain measurements do not provide enough information for quantifying ozone concentrations at the atmospheric boundary layer, where the air we breathe is located.

Synergism of measurements from multiple spectral domains offers a great potential for better characterizing ozone pollution. The first 2-band multispectral approach combining infrared (IR) measurements of IASI and the ultraviolet (UV) of GOME-2 was developed at LISA laboratory, where I conducted my thesis.

The goal of my thesis is to go a step further in the quantification of ozone pollution by including the visible (VIS) Chappuis band, in order to develop an unprecedented 3-band multispectral synergism UV+VIS+IR. First, I developed a approach for extracting ozone information from GOME-2 VIS spectra, by selecting the wavelengths mostly affected by ozone absorption and rejecting those with absorptions from other gases, as well as determining the joint adjustment variables of the approach (vertical ozone profile, surface albedo, spectral shifts, etc) and the databases needed to simulate the spectra VIS (surface albedo, spectroscopy).

Then, I implemented the multispectral method with three bands UV+VIS+IR, first on simulated low-orbit and geostationary observations from respectively IASI and GOME-2 and MAGEAQ to estimate the improvement in terms of sensitivity and precision, as compared to existing methods.

Last, I applied the 3-band multispectral approach to real satellite observations of IASI and GOME-2. Comparisons with other data shows enhanced performances of the new UV+VIS+IR observations to characterize ozone pollution events, with respect to the 2-band approach.